

EPAMINONDAS ROSA JÚNIOR

# TEORIA CINÉTICA DE UM GÁS MONOATÔMICO DENSO

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Paraná, como requisito à obtenção do grau de Mestre em Ciências.

CURITIBA

1987



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ  
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS

ATA DA DEFESA DA TESE DE MESTRADO DO SR. EPAMINONDAS ROSA JUNIOR

Em Sessão pública da defesa de tese iniciada às 15:00 horas, nesta data, após um seminário sobre o assunto da tese e arguição pela banca, esta decidiu atribuir CONCEITO A.

Curitiba, 02 de setembro de 1987.

Banca Examinadora

Prof. Gilberto.M. Kremer  
Presidente -UFPR

Prof. Silvio R.A. Salinas  
USP

Prof. Mário José de Oliveira  
USP

"Tudo fez Deus formoso no seu devido  
tempo; também pôs a eternidade no  
coração do homem..."

(Livro do Eclesiastes-cap.3 vers.11)

Dedico

Às minhas três Marias: Regina, Isabel e Gabriela.

## Agradeço

Ao Prof. Liu Kai

pelo incentivo e apoio,

ao Prof. Gilberto M. Kremer

pela dedicação, competência e disponibilidade,

ao Departamento de Física e à Coordenação do Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Paraná

pela oportunidade,

à Danusia W. Santin

pela paciente datilografia dos manuscritos.

## RESUMO

Desenvolvemos uma teoria cinética de gases densos segundo o modelo proposto por Enskog baseando-nos no método dos momentos de Grad.

Analizamos o problema de propagação de ondas longitudinais planas nos casos de 13 e 5 campos escalares.

Através do método de iteração maxwelliana determinamos os coeficientes de transporte.

## ABSTRACT

We develop a kinetic theory of dense gases according to the model proposed by Enskog. The theory is based on Grad's moment method.

We analyse the problem of longitudinal plane waves propagation in the cases of 13 and 5 scalar fields.

Using a Maxwellian iteration method we determine the transport coefficients.

## Í N D I C E

|                 | pg |
|-----------------|----|
| INTRODUÇÃO..... | 01 |

### CAPÍTULO I - FUNDAMENTOS DA TEORIA CINÉTICA DOS GASES

|     |                                      |    |
|-----|--------------------------------------|----|
| I.1 | DEFINIÇÕES BÁSICAS.....              | 03 |
| I.2 | EQUAÇÃO DE LIOUVILLE.....            | 08 |
| I.3 | DINÂMICA DE UMA COLISÃO BINÁRIA..... | 10 |
| I.4 | EQUAÇÃO DE BOLTZMANN.....            | 19 |
| I.5 | EQUAÇÃO DE ENSKOG.....               | 24 |
| I.6 | EQUAÇÃO DE TRANSPORTE I.....         | 28 |
| I.7 | EQUAÇÃO DE TRANSPORTE II.....        | 31 |

### CAPÍTULO II - TEORIA CINÉTICA DE 13 CAMPOS

|      |                             |    |
|------|-----------------------------|----|
| II.1 | CAMPOS BÁSICOS.....         | 34 |
| II.2 | EQUAÇÕES DE BALANÇO I.....  | 36 |
| II.3 | FUNÇÃO DE DISTRIBUIÇÃO..... | 38 |
| II.4 | TERMOS CONSTITUTIVOS.....   | 40 |

### CAPÍTULO III - PROPAGAÇÃO DE ONDAS HARMÔNICAS PLANAS LONGI- TUDINAIS NA TEORIA DOS 13 CAMPOS

|       |  |    |
|-------|--|----|
| III.1 | EQUAÇÕES DE CAMPO LINEARIZADAS.....        | 42 |
| III.2 | PROPAGAÇÃO DE ONDAS HARMÔNICAS PLANAS..... | 43 |



## CAPÍTULO IV - TEORIA CINÉTICA DE 5 CAMPOS ESCALARES

|      |                                 |    |
|------|---------------------------------|----|
| IV.1 | CAMPOS BÁSICOS.....             | 48 |
| IV.2 | EQUAÇÕES DE BALANÇO II.....     | 49 |
| IV.3 | TERMOS CONSTITUTIVOS.....       | 50 |
| IV.4 | COEFICIENTES DE TRANSPORTE..... | 50 |

## CAPÍTULO V - PROPAGAÇÃO DE ONDAS HARMÔNICAS PLANAS LONGITUDINAIS NA TEORIA DOS 5 CAMPOS

|     |  |    |
|-----|--|----|
| V.1 | EQUAÇÕES DE CAMPO LINEARIZADAS.....        | 54 |
| V.2 | PROPAGAÇÃO DE ONDAS HARMÔNICAS PLANAS..... | 55 |

|                 |    |
|-----------------|----|
| APÊNDICE A..... | 59 |
|-----------------|----|

|                 |    |
|-----------------|----|
| APÊNDICE B..... | 63 |
|-----------------|----|

|                   |    |
|-------------------|----|
| BIBLIOGRAFIA..... | 68 |
|-------------------|----|

## INTRODUÇÃO

A teoria cinética dos gases busca a formulação matemática das propriedades dos gases, admitindo que os mesmos sejam constituídos de um grande número de diminutas partículas (átomos e moléculas) possuidoras de rápidos movimentos. A essas partículas, dentro de certos limites de pressão e temperatura, podemos aplicar as leis da mecânica clássica. Devido aos movimentos que possuem, as partículas colidem entre si e com as paredes do recipiente que encerra o gás, descrevendo trajetórias retilíneas entre duas colisões consecutivas.

No caso de gases ideais, é grande a diferença entre as dimensões atômicas e o livre caminho médio (distância média percorrida pela partícula entre duas colisões consecutivas), sendo que para esse tipo de gás é aplicável a equação de Boltzmann.

Para o caso de gases densos Enskog propôs um modelo, introduzindo duas modificações nessa equação. A primeira modificação considera como significativo o volume ocupado pelos átomos, e a segunda considera que o aumento da densidade do gás aumenta o número de colisões.

O nosso objetivo neste trabalho é o desenvolvimento de uma teoria cinética de gases densos com 13 campos escalares. Analisamos o problema da propagação de ondas e verificamos que a ve

locidade de fase é finita, mesmo quando a frequência tende ao infinito, resultado importante para a avaliação da teoria desenvolvida. Mediante um tipo de iteração maxwelliana obtemos coeficientes de transporte compatíveis com os obtidos pelo método de Chapman-Enskog (vide [01] cap.16). Finalmente, no caso limite de 5 campos escalares, a análise da propagação de ondas nos leva ao "paradoxo da condução de calor".

Observação: adotaremos a notação cartesiana para tensores, e

$$\frac{\partial q_{<i}}{\partial x_j} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial q_i}{\partial x_j} + \frac{\partial q_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial q_n}{\partial x_n} \delta_{ij} ,$$

$$p_{<ij>} = p_{ij} - \frac{1}{3} p_{nn} \delta_{ij} , \text{ para } p_{ij} \text{ simétrico.}$$

## CAPÍTULO I

### I. FUNDAMENTOS DA TEORIA CINÉTICA DOS GASES

Introduzimos inicialmente algumas definições básicas que são importantes para o desenvolvimento subsequente deste trabalho, e que se baseiam em |01|, |02| e |03|.

A partir da equação de Liouville e da dinâmica da colisão binária, obtemos a equação de Boltzmann que é aplicável a gases não densos. Nesta equação são feitas duas modificações que nos levam à equação de transporte para gases densos proposta por Enskog |04|.

Pela introdução da função arbitrária  $\psi(\underline{x}, \underline{c}, t)$  nesta última equação e posterior integração na variável  $\underline{c}_1$ , obtemos a equação de transporte I e a equação de transporte II (com desenvolvimento, respectivamente, até os termos de 1.<sup>a</sup> e 2.<sup>a</sup> ordem em  $a$ , onde  $a$  é o diâmetro atômico). O motivo pelo qual obtemos estas duas equações de transporte será esclarecido quando tratarmos da obtenção dos coeficientes de transporte no Capítulo 4.

#### I.1 DEFINIÇÕES BÁSICAS

##### i) Espaço de Fase

Para gases monoatômicos simples, cada átomo pode ser

caracterizado pela sua posição  $\underline{x}$  no espaço e pela sua velocidade  $\underline{c}$ , não necessitando de outras coordenadas como no caso de moléculas poliatômicas.

Um elemento de volume do espaço físico conterá o ponto  $\underline{x}$  e será denotado por  $d\underline{x}$  (i.e., em coordenadas cartesianas  $d\underline{x} \equiv dx_1 dx_2 dx_3$ ). Analogamente, um elemento de volume no espaço de velocidade será denotado por  $d\underline{c}$  ( $\equiv dc_1 dc_2 dc_3$ ) e será o limite da variação da velocidade  $\underline{c}$ . A integral de volume no espaço físico será denotado por  $\int \dots d\underline{x}$  e se estenderá a todo o volume físico ocupado pelo gás. Da mesma forma, a integral de volume no espaço de velocidades será denotado por  $\int \dots d\underline{c}$  e se estenderá de  $-\infty$  a  $+\infty$ .

O espaço hexa-dimensional no qual o estado do átomo é caracterizado por suas três coordenadas espaciais e pelas três componentes da sua velocidade é chamado de espaço de fase  $\mu$ , e os pontos deste espaço são chamados de pontos de fase.

O tempo será representado pela variável  $t$  e o seu intervalo elementar por  $dt$ .

## ii) Função de distribuição

A função que contém as informações caracterizadoras do espaço de fase é a função de distribuição das velocidades  $f(\underline{x}, \underline{c}, t)$ , de forma que

$$f(\underline{x}, \underline{c}, t) d\underline{x} d\underline{c}$$

representa o número esperado de átomos situados entre  $\underline{x}$  e  $\underline{x}+d\underline{x}$ , cujas velocidades variam entre  $\underline{c}$  e  $\underline{c}+d\underline{c}$ , no instante  $t$ .

Podemos utilizar as coordenadas cartesianas e escrever

$$f(\underline{x}_i, \underline{c}_i, t) d\underline{x} d\underline{c} \equiv f(\underline{x}_i, \underline{c}_i, t) dx_1 dx_2 dx_3 dc_1 dc_2 dc_3. \quad (1.1.1)$$

A função de distribuição será tratada em maiores detalhes no Capítulo 2, com uma abordagem mais específica para o caso de gases próximos ao equilíbrio.

### iii) Densidade Numérica e de Massa

A densidade numérica  $n(\underline{x}, t)$  é uma propriedade macroscópica do gás que pode ser obtida a partir da função de distribuição, sendo definida como o número de átomos por unidade de volume na posição  $\underline{x}$  no instante  $t$ :

$$n(\underline{x}, t) = \int f(\underline{x}, \underline{c}, t) d\underline{c}. \quad (1.1.2)$$

Sendo  $m$  a massa de cada um dos átomos idênticos que constituem o gás monoatômico, a densidade de massa (ou simplesmente densidade) na posição  $\underline{x}$  no instante  $t$  é dada por

$$\rho(\underline{x}, t) = m n(\underline{x}, t). \quad (1.1.3)$$

### iv) Velocidade do Gás e Velocidade Peculiar

Considerando que um átomo com velocidade  $c_i$  tem momen-

to linear  $mc_i$ , e que existem  $f(\underline{x}, \underline{c}, t) d\underline{x} d\underline{c}$  átomos situados entre  $\underline{x}$  e  $\underline{x} + d\underline{x}$ , com velocidades variando entre  $\underline{c}$  e  $\underline{c} + d\underline{c}$ , no instante  $t$ , o momento linear desses átomos será

$$mc_i \int f(\underline{x}, \underline{c}, t) d\underline{x} d\underline{c}$$

e o momento linear total em  $d\underline{x}$  será

$$d\underline{x} \int mc_i f(\underline{x}, \underline{c}, t) d\underline{c}$$

Sendo  $\rho(\underline{x}, t) d\underline{x}$  a massa do gás em  $d\underline{x}$ , podemos expressar a velocidade do gás, em termos do momento linear, como

$$\underline{v}_i(\underline{x}, t) = \frac{1}{\rho(\underline{x}, t)} \int mc_i f(\underline{x}, \underline{c}, t) d\underline{c}. \quad (1.1.4)$$

O movimento de translação de um átomo pode ser especificado pela sua velocidade  $\underline{c}$  relativa a um referencial em repouso, ou pela sua velocidade relativa a um referencial em movimento. A velocidade do átomo relativa ao referencial que se move com velocidade  $\underline{v}$  será chamada de velocidade peculiar e será denotada por  $\underline{C}$ . Assim,

$$\underline{C} = \underline{c} - \underline{v} \quad (1.1.5)$$

ou, em coordenadas cartesianas,

$$C_i = c_i - v_i. \quad (1.1.5')$$

#### v) Energia Interna do Gás

A partir da eq.(1.1.5') podemos escrever, para a ener-

gia cinética de um átomo, que

$$\frac{1}{2} m c^2 = \frac{1}{2} m C^2 + m C_i v_i + \frac{1}{2} m v^2. \quad (1.1.6)$$

Esta equação, na média, tem o termo  $m C_i v_i$  anulado porque a velocidade peculiar média é nula; também na média, o último termo equivale a  $\frac{1}{2} \rho v^2$ , que é a energia cinética associada ao escoamento do gás como um todo. Considerando que na média  $\frac{1}{2} m C^2$  corresponde à energia interna do gás, temos que

$$u(\underline{x}, t) = \frac{1}{\rho(\underline{x}, t)} \int \frac{1}{2} m C^2 f(\underline{x}, \underline{\xi}, t) d\underline{\xi}, \quad (1.1.7)$$

onde  $u(\underline{x}, t)$  é a energia interna por unidade de massa do gás.

#### vi) Temperatura

Em teoria cinética, a temperatura  $T$  de um gás, num estado estacionário uniforme em repouso ou em translação uniforme, é definida através da relação

$$\rho u = \frac{3}{2} n k T, \quad (1.1.8)$$

onde  $k$  é uma constante única para todos os gases chamada de constante de Boltzmann, cujo valor numérico é

$$k = 1,3806 \times 10^{-16} \text{ ERG} / \text{KELVIN} \quad (1.1.9)$$



## I.2 A EQUAÇÃO DE LIOUVILLE

Seja um gás monoatômico simples no qual não há interações entre os átomos, nem entre os átomos e as paredes do recipiente. Neste caso, os valores  $x_i$  e  $c_i$  num dado instante determinarão a trajetória a ser percorrida pelo átomo desde que a força externa seja conhecida, uma vez que o movimento do átomo obedece à equação diferencial

$$\ddot{x}_i = F_i, \quad (1.2.1)$$

onde  $F_i$  é a força externa específica de corpo, independente de  $c_i$ .

Podemos considerar  $dx \, dc$  um elemento do espaço de fase  $\mu$ , e assim, cada átomo com seus valores de  $x_i$  e  $c_i$  constitui um ponto neste espaço  $\mu$ , o ponto de fase. Portanto, no volume de fase  $\Omega$ , temos  $N$  pontos de fase, ou seja,

$$N = \int_{\Omega} f(x, c, t) \, dx \, dc. \quad (1.2.2)$$

Analogamente ao volume material do espaço tridimensional, podemos definir um volume material de fase cuja superfície  $\Sigma(\Omega)$  se move com velocidade

$$\dot{\chi}_L = (\dot{x}_i, \dot{c}_i) = (c_i, \ddot{x}_i), \quad (1.2.3)$$

com  $L = 1, 2, \dots, 6$ , onde  $\chi_L$  para  $L = 1, 2, 3$  é a posição do átomo e para  $L = 4, 5, 6$  é a sua velocidade.

Como não estamos considerando as interações atômicas , nem as interações entre os átomos e as paredes do recipiente, não há criação nem destruição de pontos de fase, sendo nula a taxa de variação de N. Assim,

$$\frac{dN}{dt} = \frac{d}{dt} \int f(\underline{x}, \underline{c}, t) d\underline{x} d\underline{c} = 0. \quad (1.2.4)$$

O teorema do transporte para volumes [05]

$$\frac{d}{dt} \int_V \psi dV = \int_V \frac{\partial \psi}{\partial t} dV + \int_S \psi v_i e_i dS \quad (1.2.5)$$

aplicado ao nosso caso, fornece

$$\int_{\Omega} \frac{\partial f}{\partial t} d\underline{x} d\underline{c} + \int_{\Sigma(\Omega)} f \dot{\chi}_L e_L d\Sigma = 0, \quad (1.2.6)$$

onde  $e_L$  é a componente L do vetor unitário normal a  $\Sigma(\Omega)$  e f é uma abreviação de  $f(\underline{x}, \underline{c}, t)$ . Aplicando o teorema da divergência à segunda integral da eq. (1.2.6), obtemos

$$\int_{\Omega} \left[ \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial (f \dot{\chi}_L)}{\partial x_L} \right] d\underline{x} d\underline{c} = \int_{\Omega} \left( \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x_L} \dot{\chi}_L + f \frac{\partial \dot{\chi}_L}{\partial x_L} \right) d\underline{x} d\underline{c} = 0, \quad (1.2.7)$$

onde

$$\frac{\partial f}{\partial x_L} \dot{\chi}_L = \frac{\partial f}{\partial x_i} c_i + \frac{\partial f}{\partial c_i} \ddot{x}_i, \quad (1.2.8)$$

e

$$\frac{\partial \dot{\chi}_L}{\partial x_L} = \frac{\partial c_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \ddot{x}_i}{\partial c_i} = 0,$$

pois  $c_i$  e  $x_i$  são variáveis independentes, e da eq. (1.2.1) sabemos que  $\ddot{x}_i = F_i$  é independente de  $c_i$ . Logo,

$$\int_{\Omega} \left( \frac{\partial f}{\partial t} + c_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + F_i \frac{\partial f}{\partial c_i} \right) d\underline{x} d\underline{c} = 0. \quad (1.2.9)$$

Como esta equação deve subsistir para todo  $\Omega$ , o seu integrando deve ser nulo e teremos

$$\frac{df}{dt} = 0, \quad (1.2.10)$$

ou explicitamente,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + F_i \frac{\partial f}{\partial c_i} = 0, \quad (1.2.11)$$

que é uma equação diferencial parcial para a função de distribuição  $f$  para o caso de um gás simples cujos átomos não interagem nem entre si, nem com as paredes do recipiente, chamada equação de Liouville.

Se forem consideradas as colisões entre os átomos, poderá haver criação ou destruição de pontos de fase dentro do volume material de fase. Neste caso, a eq. (1.2.11) assume a forma

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + F_i \frac{\partial f}{\partial c_i} = P, \quad (1.2.12)$$

onde  $P$  é a densidade de fase da taxa de produção que chamaremos simplesmente de "produção", e que será detalhada na seção 1.4. Para tanto, necessitamos de uma discussão preliminar sobre a dinâmica da colisão binária.

### 1.3 DINÂMICA DE UMA COLISÃO BINÁRIA

Uma vez conhecidas as velocidades iniciais  $\dot{x}_i^\alpha$  e  $\dot{x}_i^\beta$  de

dois átomos envolvidos numa colisão binária, é possível obter suas velocidades finais  $\dot{x}_i^\alpha$  e  $\dot{x}_i^\beta$  através da dinâmica de uma colisão binária. Admitimos que as forças externas atuantes nos átomos são bastante pequenas se comparadas com aquelas envolvidas na colisão. Assim, pode ser negligenciado o efeito das forças externas na dinâmica da colisão e podemos escrever as seguintes equações do movimento para os dois átomos:

$$m_\alpha \ddot{x}_i^\alpha = - \frac{\partial \phi(x_{\beta\alpha})}{\partial x_i^\alpha}, \quad m_\beta \ddot{x}_i^\beta = \frac{\partial \phi(x_{\beta\alpha})}{\partial x_i^\alpha}, \quad (1.3.1)$$

onde  $m_\alpha$  e  $m_\beta$  são as massas dos átomos envolvidos na colisão,  $x_i^\alpha$  e  $x_i^\beta$  são seus vetores posicionais e  $\tilde{x}_{\beta\alpha} = \tilde{x}_\beta - \tilde{x}_\alpha$  é a distância (vetorial) que os separa (Fig.1.3.1).  $\phi(x_{\beta\alpha})$  é o potencial de interação para o qual admitimos um domínio limitado, ou seja,  $\phi(x_{\beta\alpha}) \rightarrow 0$  quando  $x_{\beta\alpha} \rightarrow \infty$ . Para fins de generalidade consideraremos, por enquanto, que os átomos envolvidos na colisão têm massas diferentes.

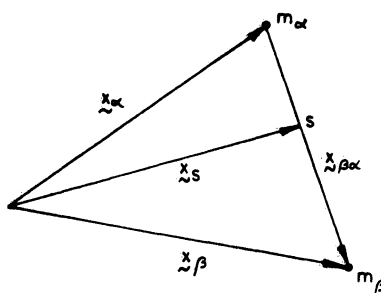


Fig. 1.3.1 - Vetores posicionais dos átomos envolvidos na colisão binária, do seu centro de massa  $s$  e distância vetorial entre os átomos.

Definimos razão mássica como

$$M_{\alpha\beta} = \frac{m_\alpha}{m_\alpha + m_\beta}, \quad M_{\beta\alpha} = \frac{m_\beta}{m_\alpha + m_\beta}, \quad (1.3.2)$$

e massa reduzida como

$$\mu_{\alpha\beta} = \frac{m_\alpha m_\beta}{m_\alpha + m_\beta}, \quad (1.3.3)$$

de forma que o vetor posicional  $\underline{x}_s$  do centro de massa e os vetores posicionais  $\underline{x}_{\alpha s}$  e  $\underline{x}_{\beta s}$  dos átomos  $\alpha$  e  $\beta$  relativos ao centro de massa s ficam:

$$\underline{x}_s = M_{\alpha\beta} \underline{x}_{\alpha} + M_{\beta\alpha} \underline{x}_{\beta}, \quad \underline{x}_{\alpha s} = -M_{\beta\alpha} \underline{x}_{\beta\alpha}, \quad \underline{x}_{\beta s} = M_{\alpha\beta} \underline{x}_{\alpha\beta}. \quad (1.3.4)$$

A soma das equações do movimento (1.3.1) fornece  $\ddot{\underline{x}}_s = 0$ . Portanto,  $\dot{\underline{x}}_s = \text{CTE}$ , e assim, as velocidades assintóticas  $\underline{c}_\alpha$ ,  $\underline{c}_\beta$  (antes da colisão) e  $\underline{c}'_\alpha$ ,  $\underline{c}'_\beta$  (depois da colisão) obedecem à equação

$$m_\alpha \underline{c}_\alpha + m_\beta \underline{c}_\beta = m_\alpha \underline{c}'_\alpha + m_\beta \underline{c}'_\beta, \quad (1.3.5)$$

que representa a lei de conservação do momento linear para os átomos envolvidos na colisão.

Multiplicando as equações (1.3.1)<sub>1,2</sub> respectivamente, por  $1/m_\alpha$  e  $1/m_\beta$ , e subtraindo uma da outra, obtemos

$$\mu_{\alpha\beta} \ddot{\underline{x}}_i^{\alpha\beta} = - \frac{\partial \phi(\underline{x}_{\beta\alpha})}{\partial \underline{x}_{\beta\alpha}} \cdot \frac{\underline{x}_i^{\beta\alpha}}{x_{\beta\alpha}}, \quad (1.3.6)$$

que, multiplicada escalarmente por  $\dot{\underline{x}}_i^{\beta\alpha}$  fornece

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\mu_{\alpha\beta}}{2} \dot{\underline{x}}_{\beta\alpha}^2 \right) = - \frac{\partial \phi(\underline{x}_{\beta\alpha})}{\partial t} \quad (1.3.7)$$

Portanto, temos

$$\frac{\mu_{\alpha\beta}}{2} \dot{x}_{\beta\alpha}^2 + \phi(x_{\beta\alpha}) = \text{CONSTANTE}, \quad (1.3.8)$$

que representa a lei de conservação da energia durante a colisão.

Introduzindo as velocidades assintóticas relativas antes e depois da colisão, respectivamente,

$$\vec{g}_{\beta\alpha} = \vec{v}_{\beta} - \vec{v}_{\alpha}, \quad \vec{g}'_{\beta\alpha} = \vec{v}'_{\beta} - \vec{v}'_{\alpha}, \quad (1.3.9)$$

e tendo em conta a eq. (1.3.8), obtemos

$$g_{\beta\alpha} = g'_{\beta\alpha}, \quad (1.3.10)$$

pois  $\phi(x_{\beta\alpha}) \rightarrow 0$  quando  $x_{\beta\alpha} \rightarrow \infty$ . Assim, são iguais os módulos das velocidades relativas dos dois átomos antes e depois da colisão.

Multiplicando vetorialmente a eq. (1.3.6) por  $\vec{x}_{\beta\alpha}$ , obtemos

$$\frac{d}{dt} \left( \vec{x}_{\beta\alpha} \times \dot{\vec{x}}_{\beta\alpha} \right) = 0, \quad \text{donde} \quad \vec{x}_{\beta\alpha} \times \dot{\vec{x}}_{\beta\alpha} = \text{CONSTANTE}, \quad (1.3.11)$$

que expressa a conservação do momento angular.

Denotando por  $b(b')$  a projeção de  $\vec{x}_{\beta\alpha}(\vec{x}'_{\beta\alpha})$  ortogonal - mente a  $\vec{g}_{\beta\alpha}(\vec{g}'_{\beta\alpha})$ , podemos escrever

$$g_{\beta\alpha} b = g'_{\beta\alpha} b', \quad (1.3.12)$$

e teremos

$$b = b', \quad (1.3.13)$$

chamado de parâmetro de colisão.

Considerando agora o caso de um gás monoatômico simples, os átomos envolvidos na colisão binária terão a mesma massa  $m$ .

Denotaremos as velocidades de um dos átomos pelo índice 1 enquanto que as do outro átomo serão representadas sem índice. Portanto,  $\underline{c}$  e  $\underline{c}_1$  serão as velocidades dos átomos antes da colisão (i.e., antes dos dois átomos terem iniciado apreciavelmente a influência recíproca), e  $\underline{c}'$  e  $\underline{c}'_1$  serão as suas velocidades depois da colisão (i.e., depois dos dois átomos terem terminado apreciavelmente a influência recíproca).

As equações de conservação do momento linear e da energia ficam, respectivamente,

$$m\underline{c} + m\underline{c}_1 = m\underline{c}' + m\underline{c}'_1, \quad (1.3.14)$$

e

$$\frac{1}{2}m\underline{c}^2 + \frac{1}{2}m\underline{c}_1^2 = \frac{1}{2}m\underline{c}'^2 + \frac{1}{2}m\underline{c}'_1^2. \quad (1.3.15)$$

A velocidade do centro de massa (constante durante a colisão) e agora denotada por  $\underline{G}$  passa a ser

$$\underline{G} = \frac{\underline{c} + \underline{c}_1}{2} = \frac{\underline{c}' + \underline{c}'_1}{2}, \quad (1.3.16)$$

e as velocidades relativas antes e depois da colisão se tornam, respectivamente,

$$\underline{g} = \underline{c}_1 - \underline{c}, \quad \underline{g}' = \underline{c}'_1 - \underline{c}', \quad (1.3.17)$$

com

$$\underline{g} = \underline{g}', \quad (1.3.18)$$

ou seja, a colisão simplesmente promove a rotação de  $\underline{g}$ , sem alterar o seu módulo.

A especificação de  $\underline{G}$ ,  $\underline{g}$  e dos ângulos  $\theta$  e  $\epsilon$  (Fig.1.3.2) determina completamente  $\underline{g}'$ . Uma vez conhecido  $\underline{g}'$ , podemos calcular  $\underline{c}'$  e  $\underline{c}'_1$  pois das equações (1.3.16) e (1.3.17), obtemos

$$\underline{c} = \underline{G} - \frac{1}{2}\underline{g}, \quad \underline{c}_1 = \underline{G} + \frac{1}{2}\underline{g}, \quad (1.3.19)$$

$$\underline{c}' = \underline{G} - \frac{1}{2}\underline{g}', \quad \underline{c}'_1 = \underline{G} + \frac{1}{2}\underline{g}'. \quad (1.3.20)$$

Portanto, a colisão fica completamente determinada pela especificação de  $\underline{G}$ ,  $\underline{g}$ ,  $\theta$  e  $\epsilon$ , ou de  $\underline{c}$ ,  $\underline{c}_1$ ,  $\theta$  e  $\epsilon$ .

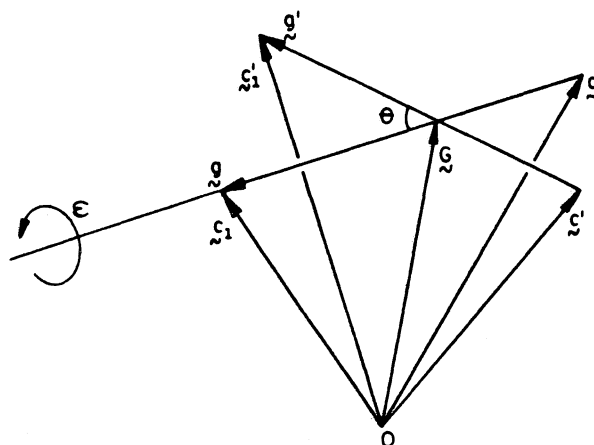


Fig. 1.3.2 - Geometria da colisão binária no sistema de coordenadas centrado em G (centro de massa).  $\theta$  (ângulo polar) e  $\epsilon$  (ângulo azimutal) definem a orientação de  $\underline{g}'$  em relação a  $\underline{g}$ .



O parâmetro de colisão e o ângulo  $\epsilon$  podem ser substituídos pelo vetor de colisão  $\underline{k}$ , definido como o vetor unitário com orientação  $\underline{g} - \underline{g}'$ , ou seja,

$$\underline{k} = \frac{\underline{g} - \underline{g}'}{|\underline{g} - \underline{g}'|}. \quad (1.3.21)$$

Com o auxílio deste vetor, podemos escrever equações explícitas que relacionam  $\underline{c}$ ,  $\underline{c}_1$  a  $\underline{c}'$ ,  $\underline{c}'_1$ . A Fig. 1.3.3 mostra a trajetória de um átomo com índice 1 e um plano A perpendicular a  $\underline{g}$ , plano este que contém o átomo sem índice. Como são iguais os módulos de  $\underline{g}$  e de  $\underline{g}'$ , o vetor  $\underline{k}$  tem a direção da bissetriz do ângulo for

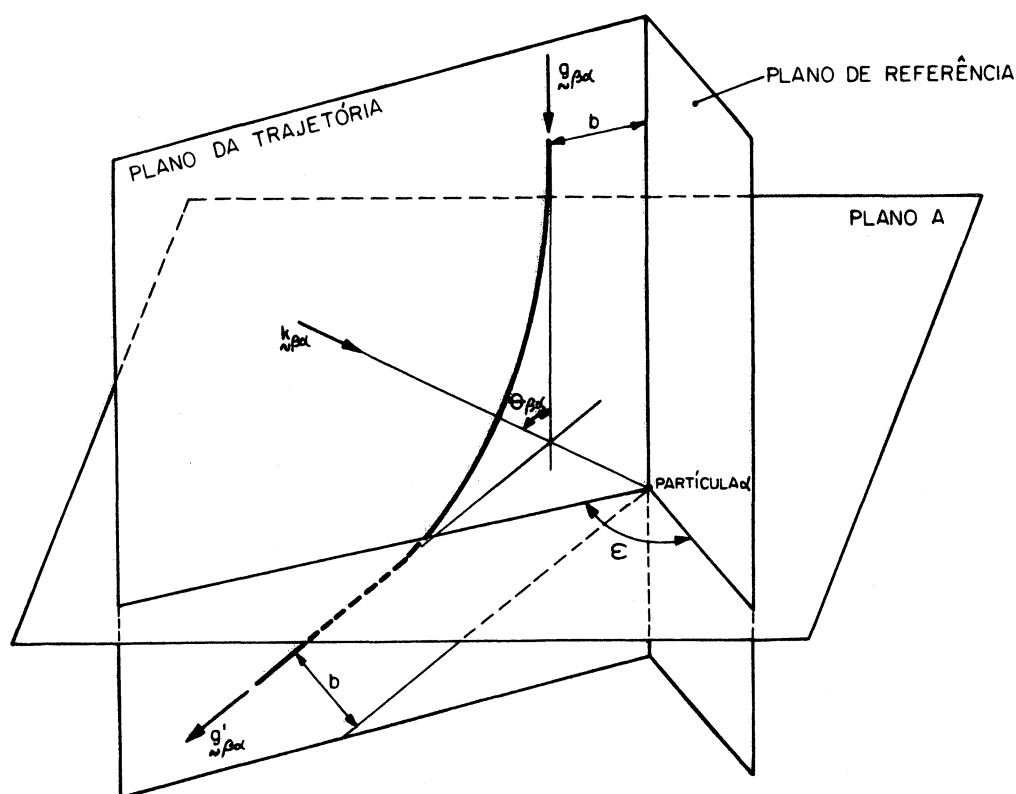


Fig. 1.3.3 - Vetor de colisão  $\underline{k}$ .

mado pelas direções destas duas velocidades. Portanto, podemos

escrever que

$$\underline{g} \cdot \underline{k} = - \underline{g}' \cdot \underline{k}, \quad (1.3.22)$$

e assim,

$$\underline{g} - \underline{g}' = \underline{k} \left[ \underline{k} \cdot (\underline{g} - \underline{g}') \right]. \quad (1.3.23)$$

Logo,

$$\underline{g} - \underline{g}' = 2 \underline{k} (\underline{g} \cdot \underline{k}), \quad \underline{g} - \underline{g}' = - 2 \underline{k} (\underline{g}' \cdot \underline{k}) \quad (1.3.24)$$

Estas expressões nos permitem escrever  $\underline{c}'$ ,  $\underline{c}'_1$  em função de  $\underline{c}$ ,  $\underline{c}_1$ , bem como  $\underline{c}$ ,  $\underline{c}_1$  em função de  $\underline{c}'$ ,  $\underline{c}'_1$  na forma

$$\underline{c}' = \underline{c} + \underline{k} (\underline{g} \cdot \underline{k}), \quad \underline{c}'_1 = \underline{c}_1 - \underline{k} (\underline{g} \cdot \underline{k}) \quad (1.3.25)$$

e

$$\underline{c} = \underline{c}' + \underline{k} (\underline{g}' \cdot \underline{k}), \quad \underline{c}_1 = \underline{c}'_1 - \underline{k} (\underline{g}' \cdot \underline{k}). \quad (1.3.26)$$

O primeiro par de equações (1.3.25) mostra que podemos conhecer as velocidades finais  $\underline{c}'$ ,  $\underline{c}'_1$  a partir das velocidades iniciais  $\underline{c}$ ,  $\underline{c}_1$  e do vetor de colisão  $\underline{k}$ . Por outro lado, o segundo par de equações (1.3.26) nos permite conhecer as velocidades iniciais  $\underline{c}$ ,  $\underline{c}_1$  a partir das velocidades finais  $\underline{c}'$ ,  $\underline{c}'_1$  e do vetor de colisão  $\underline{k}$ . Uma vez que são lineares as equações (1.3.25) e (1.3.26) e que a transformação de  $\underline{c}$ ,  $\underline{c}_1$  para  $\underline{c}'$ ,  $\underline{c}'_1$  pode ser feita simplesmente permutando as variáveis com e sem plicas, segue-se que o Jacobiano da transformação  $(\underline{c}, \underline{c}_1) \rightarrow (\underline{c}', \underline{c}'_1)$  deve ser igual ao Jacobiano da transformação  $(\underline{c}', \underline{c}'_1) \rightarrow (\underline{c}, \underline{c}_1)$ :

$$\frac{\partial(\xi, \xi_1)}{\partial(\xi', \xi'_1)} = \frac{\partial(\xi', \xi'_1)}{\partial(\xi, \xi_1)} \quad (1.3.27)$$

Sabendo-se que para qualquer transformação

$$\frac{\partial(\xi, \xi_1)}{\partial(\xi', \xi'_1)} \cdot \frac{\partial(\xi', \xi'_1)}{\partial(\xi, \xi_1)} = 1, \quad (1.3.28)$$

temos que

$$d\xi \, d\xi_1 = d\xi' \, d\xi'_1. \quad (1.3.29)$$

Consideremos agora o caso de uma colisão referida a um sistema de coordenadas onde um dos átomos (sem índice) estará em repouso com seu centro na origem do referencial. O centro do outro átomo (com índice 1) descreverá uma trajetória num plano que contém o ponto O (vide Fig. 1.3.4), com velocidades  $\underline{g}$  e  $\underline{g}'$  antes e depois da colisão,

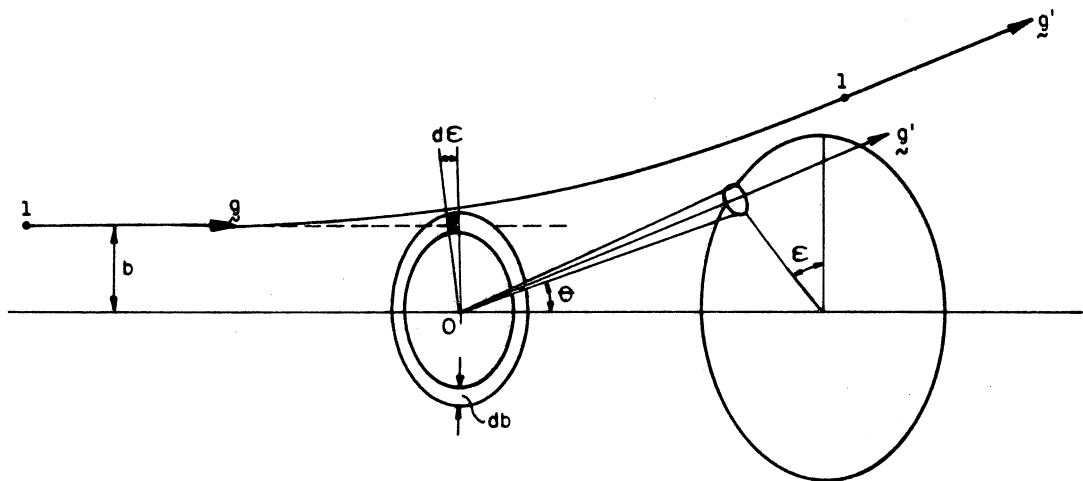


Fig. 1.3.4 - Geometria da colisão binária: o átomo sem índice está em repouso com seu centro na origem O do sistema de coordenadas, enquanto o átomo com índice 1 descreve uma trajetória plana com velocidades  $\underline{g}$  e  $\underline{g}'$  antes e depois da colisão, respectivamente.

tes e depois da colisão, respectivamente. A distância do ponto  $O$  a qualquer uma das assíntotas à trajetória é o parâmetro de colisão  $b$ .

Escolhamos o referencial com o eixo polar paralelo a  $g$ . Uma vez que  $g = g'$ , o estado final será especificado pelos dois ângulos de espalhamento  $\theta$  e  $\epsilon$ , sendo  $\theta$  o ângulo entre o eixo polar e  $g'$  e  $\epsilon$  o ângulo azimutal especificando a posição do plano da trajetória no espaço.

Feitas estas considerações sobre a dinâmica da colisão binária, trataremos a seguir da equação de Boltzmann.

#### I.4 EQUAÇÃO DE BOLTZMANN

Podemos obter uma expressão para a produção  $P$  da equação (1.2.12) a partir das seguintes suposições:

- i) contribuem para  $P$  somente colisões binárias;
- ii) são negligenciáveis os efeitos das forças externas no resultado dinâmico da colisão;
- iii) a velocidade de uma molécula é independente de sua posição (hipótese do "caos molecular").

A argumentação é devida a Boltzmann, conhecida como Stosszahlansatz (do alemão, suposição do número de colisões).

Consideremos, num gás monoatômico simples, a colisão en

tre dois átomos, um com velocidade  $\underline{c}$ , outro com velocidade  $\underline{c}_1$ .

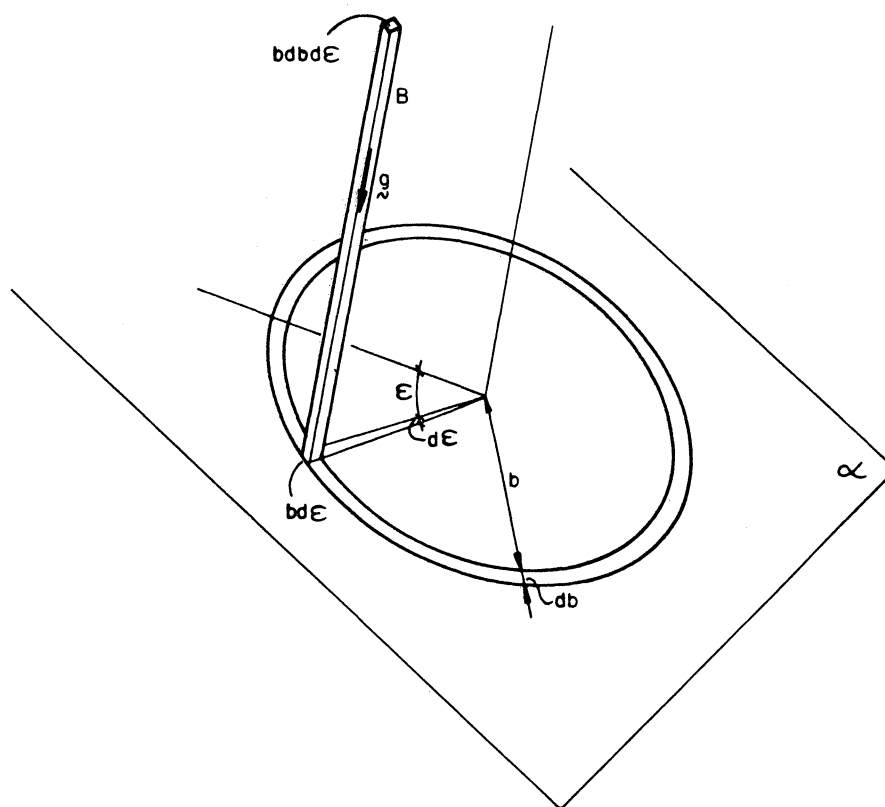


Fig. 1.4.1 - O cilindro de base  $bdbd\epsilon$  e altura  $gdt$  é chamado de cilindro de colisão associado ao átomo considerado.

A Fig. 1.4.1 mostra o primeiro átomo (sem índice) em repouso no plano  $\alpha$ , enquanto o outro átomo (com índice 1) se aproxima desse plano segundo um ângulo reto e com velocidade  $\underline{g}$ . Se, num instante  $t$ , o átomo que se aproxima se encontra no cilindro B de base  $bdbd\epsilon$  e altura  $gdt$ , haverá durante o intervalo de tempo  $dt$ , que é grande se comparado à duração da colisão, interações que alteram as velocidades dos dois átomos. Teremos pois, modificações na densidade de fase da produção.

De acordo com a definição de função de distribuição de

velocidades (vide ítem 1.1.ii) o número esperado de átomos do tipo 1 com velocidades entre  $\underline{c}_1$  e  $\underline{c}_1 + d\underline{c}_1$  localizados no cilindro de colisão de volume  $g b d b d \epsilon d t$  será

$$f_1(\underline{x}, \underline{c}_1, t) g b d b d \epsilon d \underline{c}_1 d t. \quad (1.4.1)$$

Sendo  $f(\underline{x}, \underline{c}, t) d\underline{x} d\underline{c}$  o número esperado de átomos com velocidades entre  $\underline{c}$  e  $\underline{c} + d\underline{c}$ , localizados entre  $\underline{x}$  e  $\underline{x} + d\underline{x}$ , no instante  $t$ , temos que

$$f(\underline{x}, \underline{c}, t) f_1(\underline{x}, \underline{c}_1, t) g b d b d \epsilon d \underline{c} d \underline{c}_1 d \underline{x} \quad (1.4.2)$$

representa o número esperado de colisões entre átomos com velocidades entre  $\underline{c}$  e  $\underline{c} + d\underline{c}$ , e  $\underline{c}_1$  e  $\underline{c}_1 + d\underline{c}_1$ . Estes átomos estão situados entre  $\underline{x}$  e  $\underline{x} + d\underline{x}$ , com variáveis geométricas de colisão variando entre  $b$  e  $b + db$ , e  $\epsilon$  e  $\epsilon + d\epsilon$ , durante o intervalo de tempo  $dt$ .

Consideremos o conjunto de átomos sem índice, ou seja, átomos situados entre  $\underline{x}$  e  $\underline{x} + d\underline{x}$  e com velocidades entre  $\underline{c}$  e  $\underline{c} + d\underline{c}$ . Cada átomo deste conjunto terá sua velocidade alterada após sofrer uma colisão, o que implica na perda desse átomo pelo conjunto. Assim, o número de átomos perdidos por este conjunto, durante o intervalo de tempo  $dt$ , devido a colisões com átomos que têm velocidades entre  $\underline{c}_1$  e  $\underline{c}_1 + d\underline{c}_1$  e tal que as variáveis geométricas da colisão variem entre  $b$  e  $b + db$ , e  $\epsilon$  e  $\epsilon + d\epsilon$ , é dado pela eq. (1.4.2). Esta expressão integrada em  $\underline{c}_1$ ,  $b$  e  $\epsilon$  no instante  $t$  fornece a taxa de destruição de pontos de fase  $P^- d\underline{c} d\underline{x} dt$ . Logo,

$$\rho^- = \int f(\underline{x}, \underline{\zeta}, t) f_1(\underline{x}, \underline{\zeta}_1, t) g b db d\varepsilon d\varepsilon_1. \quad (1.4.3)$$

De forma similar podemos calcular a taxa de criação de pontos de fase  $P^+ d\underline{\zeta} d\underline{x} dt$ . Para isso, precisamos considerar os átomos que têm velocidades entre  $\underline{\zeta}$  e  $\underline{\zeta} + d\underline{\zeta}$  e entre  $\underline{\zeta}_1$  e  $\underline{\zeta}_1 + d\underline{\zeta}_1$  depois da colisão, o que será feito com o auxílio da colisão inversa. Seja a colisão de um átomo de massa  $m$  e velocidade  $\underline{\zeta}'$  com outro átomo de mesma massa e velocidade  $\underline{\zeta}_1'$ . Depois da colisão o primeiro átomo terá velocidade  $\underline{\zeta}$  e o outro terá velocidade  $\underline{\zeta}_1$ . Tal colisão é chamada de colisão inversa (ver Fig. 1.4.2).

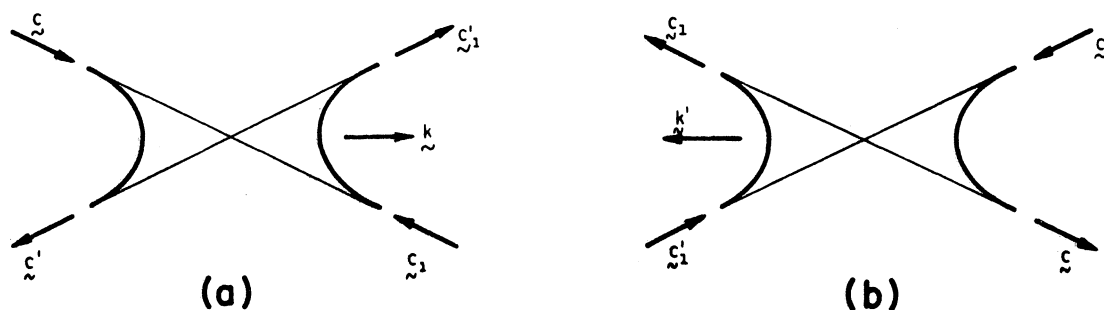


Fig. 1.4.2 - Colisão direta (a); colisão inversa (b).

O número de colisões entre  $\underline{x}$  e  $\underline{x} + d\underline{x}$ , durante o intervalo de tempo  $dt$ , envolvendo átomos com velocidades entre  $\underline{\zeta}'$  e  $\underline{\zeta}' + d\underline{\zeta}'$  e átomos com velocidades entre  $\underline{\zeta}_1'$  e  $\underline{\zeta}_1' + d\underline{\zeta}_1'$  antes da colisão, com parâmetro de impacto entre  $b$  e  $b + db$ , e ângulo azimutal entre  $\varepsilon$  e  $\varepsilon + d\varepsilon$ , será

$$f(\underline{x}, \underline{\zeta}', t) f_1(\underline{x}, \underline{\zeta}_1', t) g' b' db' d\varepsilon d\varepsilon_1' d\underline{x} dt, \quad (1.4.4)$$

que, devido às equações (1.3.13), (1.3.18) e (1.3.29) é igual a

$$f(x, \underline{c}, t) f_1(x, \underline{c}_1, t) g b db d\epsilon d\underline{c}_1 dt. \quad (1.4.5)$$

Esta expressão integrada em  $\underline{c}_1$ ,  $b$  e  $\epsilon$ , no instante  $t$ , nos dá a taxa de criação de pontos de fase, ou seja,

$$P^+ = \int f(x, \underline{c}, t) f_1(x, \underline{c}_1, t) g b db d\epsilon d\underline{c}_1. \quad (1.4.6)$$

Combinando (1.4.3) e (1.4.8) obtemos a taxa de variação na qual a função de distribuição  $f$  (átomos do tipo sem índice) está sendo alterada devido a colisões com átomos do tipo com índice 1, ou seja, obtemos a densidade de fase da taxa de produção  $P$  da eq. (1.2.12). Assim,

$$P = P^+ - P^- = \int (f' f'_1 - f f_1) g b db d\epsilon d\underline{c}_1, \quad (1.4.7)$$

onde utilizamos as seguintes abreviações:

$$\begin{aligned} f &\equiv f(x, \underline{c}, t), & f' &\equiv f(x, \underline{c}', t), \\ f_1 &\equiv f_1(x, \underline{c}_1, t), & f'_1 &\equiv f_1(x, \underline{c}'_1, t). \end{aligned} \quad (1.4.8)$$

Podemos agora, a partir da eq. (1.2.12), escrever a equação de evolução da função de distribuição de velocidades no espaço de fase. Trata-se da equação íntegro-diferencial

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + F_i \frac{\partial f}{\partial c_i} = \int (f' f'_1 - f f_1) g b db d\epsilon d\underline{c}_1, \quad (1.4.9)$$

chamada de equação de Boltzmann.



## 1.5 EQUAÇÃO DE ENSKOG

A equação de Boltzmann expressa na forma da eq.(1.4.9) tem sua aplicação restrita a gases não densos (dimensões atômicas pequenas se comparadas ao livre caminho médio), onde a transferência das propriedades atômicas é consequência do movimento livre dos átomos entre as colisões. Para o caso de gases densos, as dimensões atômicas não mais são pequenas em relação ao livre caminho médio. Surge, dessa forma, um mecanismo adicional de transferência de momento linear e energia.

Enskog [04] foi quem primeiro estudou essa transferência devida a colisões nos gases densos, estendendo a teoria cinética de gases com densidades baixas.

A vantagem do modelo de Enskog é que as colisões são instantâneas (esferas rígidas) e é negligenciável a probabilidade de colisões múltiplas (colisões simultâneas de mais de dois átomos). As correções introduzidas por Enskog levam em conta que o diâmetro atômico não mais é pequeno em comparação ao livre caminho médio. Esta consideração tem como consequência que durante a colisão, momento linear e energia são transferidos de uma distância igual à distância que separa os centros dos dois átomos, ou seja, no caso de gás monoatômico simples essa distância é igual ao diâmetro da esfera representativa do átomo.

Apesar de válida somente para o modelo de esfera rígida, segundo Ferziger-Kaper [02] a teoria de Enskog pode ter seus resultados aplicados para gases reais, desde que seja feita uma escolha adequada do diâmetro efetivo de colisão.

Vamos então às considerações devidas a Enskog. Seja a Fig. 1.5.1 onde são representados dois átomos no instante da colisão, o átomo 1 com velocidades relativas  $\underline{g}$  e  $\underline{g}'$  antes e depois da colisão, respectivamente. O vetor de colisão  $\underline{k}$  dado pela eq. (1.3.21), neste caso tem a mesma direção da reta que passa pelos centros dos dois átomos. Ainda da Fig. 1.5.1, observamos que  $\beta = \frac{1}{2}(\pi - \alpha)$ . Com o auxílio da Fig. 1.3.4, notamos que o

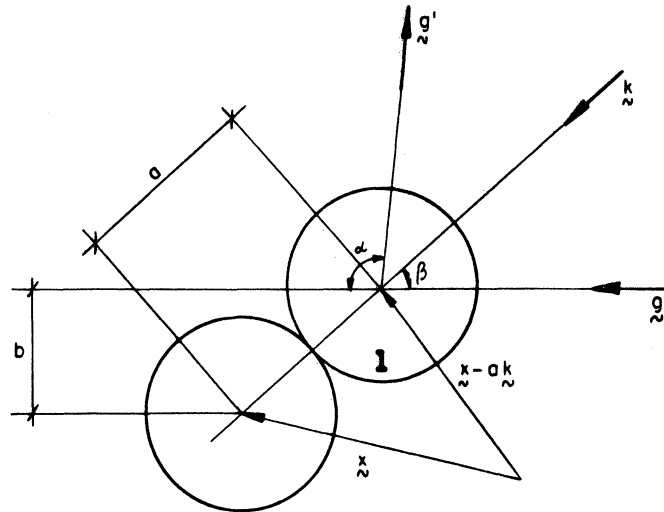


Fig. 1.5.1 - Geometria da colisão entre duas esferas rígidas.

plano definido por  $\underline{g}'$  e  $\underline{k}$  forma um ângulo  $\epsilon$  com o plano referencial que contém  $\underline{g}$ . Assim,  $\beta$  e  $\epsilon$  são coordenadas polares que definem a direção de  $\underline{k}$  na esfera de raio unitário, e portanto, podemos escrever

$$d^2k = \sin\beta \, d\beta \, d\epsilon, \quad (1.5.1)$$

onde o índice 2 que aparece no primeiro membro diz respeito à diferencial do vetor unitário  $\underline{k}$  ( $d^2k \equiv d\underline{k}$ ). Ainda da Fig. 1.5.1, temos que

$$b = a \sin \beta \quad (1.5.2)$$

e assim,

$$d^2k = \frac{1}{a^2 \cos \beta} b db d\epsilon, \quad (1.5.3)$$

donde se conclui que o ângulo sólido infinitesimal  $gbdbd\epsilon$  é igual a  $a^2 g \cos \beta d^2k$  e a eq. (1.4.2) pode ser escrita na forma

$$f(\underline{x}, \underline{c}, t) f_1(\underline{x}_1, \underline{c}_1, t) a^2 (g \cdot \underline{k}) d\underline{k} d\underline{c} d\underline{c}_1 d\underline{x}. \quad (1.5.4)$$

Como estamos tratando de gases densos, os centros dos dois átomos que colidem não se encontram no mesmo ponto, uma vez que as dimensões atômicas estão agora sendo consideradas. Então, se no instante da colisão o centro do primeiro átomo (sem índice) se encontra na posição  $\underline{x}$ , o centro do segundo átomo (índice 1) estará na posição  $\underline{x} - a\underline{k}$  (ver Fig. 1.5.1), de forma que  $f(\underline{x}, \underline{c}_1, t)$  precisa ser substituída por  $f(\underline{x} - a\underline{k}, \underline{c}_1, t)$ .

Também, uma vez que o gás é denso, o volume por átomo  $1/n$ , onde  $n$  é a densidade numérica do gás, se torna comparável ao volume do átomo que é  $\frac{4}{3} \pi \left(\frac{a}{2}\right)^3$ . Assim, o volume no qual um átomo pode estar situado (ou seja, o "volume livre") se reduz, e a probabilidade de colisão aumenta. Este fato é levado em conta ao se multiplicar a expressão (1.5.4) por um fator  $\chi$ , que é função da densidade numérica, e portanto da posição e do tempo. A função deve ser calculada no ponto de contacto  $(\underline{x} - \frac{1}{2} a\underline{k})$  entre os dois átomos que colidem, e a expressão (1.5.4) corrigida assume a forma

$$\chi\left(\underline{x}-\frac{1}{2}a\underline{k}, t\right) f(\underline{x}) f_1(\underline{x}-a\underline{k}) a^2(\underline{g}\cdot\underline{k}) d\underline{k} d\underline{c} d\underline{c}_1 d\underline{x} \quad (1.5.5)$$

onde

$$f(\underline{x}) \equiv f(\underline{x}, \underline{c}, t), \quad f_1(\underline{x}-a\underline{k}) \equiv f_1(\underline{x}-a\underline{k}, \underline{c}_1, t).$$

Na expressão (1.5.5),  $f_1(\underline{x}-a\underline{k})$  é a função de distribuição para os átomos cujos centros de massa estão situados entre  $\underline{x}-a\underline{k}$  e  $\underline{x}-a\underline{k}+d\underline{x}$ , átomos estes com velocidades entre  $\underline{c}_1$  e  $\underline{c}_1+d\underline{c}_1$ , no instante  $t$ .

A colisão direta especificada pelas variáveis  $\underline{c}$ ,  $\underline{c}_1$  e  $\underline{k}$  corresponde uma colisão inversa onde  $\underline{c}$  e  $\underline{c}_1$  são as velocidades dos dois átomos depois da colisão e  $-\underline{k}$  é o vetor de colisão (ver Fig. 1.4.2). Na colisão inversa, o centro do segundo átomo estará na posição  $\underline{x}+a\underline{k}$  e o ponto de contacto em  $\underline{x}+\frac{1}{2}a\underline{k}$ . Assim, o número médio de colisões inversas na unidade de tempo no instante  $t$ , tal que o centro do primeiro átomo se encontra no elemento de volume  $d\underline{x}$ , as velocidades dos dois átomos depois da colisão variam entre  $\underline{c}$  e  $\underline{c}+d\underline{c}$ ,  $\underline{c}_1$  e  $\underline{c}_1+d\underline{c}_1$ , e a reta que contém os centros dos dois átomos no instante da colisão tem a orientação de  $-\underline{k}$ , onde  $\underline{k}$  varia entre  $\underline{k}$  e  $\underline{k}+d\underline{k}$ , será

$$\chi\left(\underline{x}+\frac{1}{2}a\underline{k}\right) f'(\underline{x}) f'_1(\underline{x}+a\underline{k}) a^2(\underline{g}\cdot\underline{k}) d\underline{k} d\underline{c} d\underline{c}_1 d\underline{x}, \quad (1.5.6)$$

onde foi utilizada a mesma notação da eq. (1.5.5). Assim, encontramos a equação íntegro-diferencial para a função de distribuição das velocidades para o caso de um gás denso constituído de átomos esféricos com diâmetro  $a$ :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + F_i \frac{\partial f}{\partial c_i} = \int \left[ \chi \left( \underline{x} + \frac{1}{2} a \underline{k} \right) f'(\underline{x}) f_1'(\underline{x} - a \underline{k}) - \chi \left( \underline{x} - \frac{1}{2} a \underline{k} \right) f(\underline{x}) f_1(\underline{x} - a \underline{k}) \right] a^2(\underline{g} \cdot \underline{k}) d\underline{k} d\underline{c}_1 \quad (1.5.7)$$

que é a equação de Enskog.

Admitindo que as condições do gás sejam suficiente suas, expandimos cada uma das funções  $\chi(\underline{x} \pm \frac{1}{2} a \underline{k})$  e  $f_1(\underline{x} \pm a \underline{k})$  em série de Taylor em torno de  $\underline{x}$  e negligenciamos os termos de ordem superior aos de segunda ordem. Nestas condições, a equação de Enskog pode ser escrita na forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + c_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + F_i \frac{\partial f}{\partial c_i} = & \int \left\{ \chi \left( f_1' f_1' - f f_1 \right) + a k_i \left[ \chi \left( f_1' \frac{\partial f_1'}{\partial x_i} + f \frac{\partial f_1}{\partial x_i} \right) + \right. \right. \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial \chi}{\partial x_i} \left( f_1' f_1' + f f_1 \right) \left. \right] + \frac{a^2}{2} \left[ \chi k_i k_j \left( f_1' \frac{\partial^2 f_1'}{\partial x_i \partial x_j} - f \frac{\partial^2 f_1}{\partial x_i \partial x_j} \right) + \left( k_i \frac{\partial \chi}{\partial x_i} \right) k_j \left( f_1' \frac{\partial f_1'}{\partial x_j} - f \frac{\partial f_1}{\partial x_j} \right) + \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{4} k_i k_j \frac{\partial^2 \chi}{\partial x_i \partial x_j} \left( f_1' f_1' - f f_1 \right) \right] \right\} a^2(\underline{g} \cdot \underline{k}) d\underline{k} d\underline{c}_1, \end{aligned} \quad (1.5.8)$$

onde foram usadas abreviações análogas às expressas em (1.4.8), e

$$\chi \equiv \chi(\underline{x}, t).$$

## 1.6 EQUAÇÃO DE TRANSPORTE I

Multiplicando a equação de Enskog na forma (1.5.8) por uma função arbitrária  $\psi(\underline{x}, \underline{c}, t)$ , integrando em todos os valores de  $\underline{c}$  e desenvolvendo até os termos de 1.<sup>a</sup> ordem em  $a$ , obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int \psi f d\underline{c} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \int \psi c_i f d\underline{c} - \frac{a}{2} \int \psi \chi k_i \left( f_1' f_1' + f f_1 \right) d\underline{c}_1 - \frac{a^2}{4} \int \psi \chi k_i k_j \left( f_1' \frac{\partial f_1'}{\partial x_j} - f \frac{\partial f_1}{\partial x_j} + \right. \right. \\ \left. \left. + f_1 \frac{\partial f}{\partial x_j} - f_1' \frac{\partial f_1'}{\partial x_j} \right) d\underline{c}_1 + \frac{a^2}{4} \int \frac{\partial \psi}{\partial x_j} \chi k_i k_j \left( f_1' f_1' - f f_1 \right) d\underline{c}_1 \right] = \end{aligned} \quad (1.6.1)$$

$$\begin{aligned}
&= \int \left( \frac{\partial \psi}{\partial t} + c_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i} + F_i \frac{\partial \psi}{\partial c_i} \right) f d\zeta + \int \psi \chi (f'_{f_1} - f_{f_1}) d\mathcal{T} + \frac{a}{2} \int \psi \chi k_i \left( f' \frac{\partial f'_1}{\partial x_i} - f_1 \frac{\partial f'_1}{\partial x_i} + \right. \\
&\quad \left. + f \frac{\partial f_1}{\partial x_i} - f_1 \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) d\mathcal{T} - \frac{a}{2} \int \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \chi k_i (f' f'_1 + f f_1) d\mathcal{T}, \quad (1.6.1)
\end{aligned}$$

onde

$$\psi \equiv \psi(\underline{x}, \underline{c}, t)$$

e

$$(1.6.2)$$

$$d\mathcal{T} \equiv a^2 (\underline{g} \cdot \underline{k}) d\underline{k} d\underline{\zeta} d\underline{c}_1.$$

Considerando que na colisão inversa (Fig. 1.4.2b) teremos o vetor de colisão  $\underline{k}'$ , a velocidade relativa antes da colisão  $\underline{g}'$  e a função arbitrária  $\psi'(\underline{x}, \underline{c}', t)$ , onde

$$\underline{k}' = -\underline{k},$$

$$(1.6.3)$$

$$\underline{g}' = -\underline{g},$$

podemos operar em alguns termos da eq. (1.6.1), como por exemplo

$$-\frac{a}{2} \int \psi \chi k_i (f' f'_1 + f f_1) d\mathcal{T} = -\frac{a}{2} \left( \int \psi \chi k_i f f_1 d\mathcal{T} - \int \psi' \chi k_i f f_1 d\mathcal{T} \right) = \frac{a}{2} \int (\psi' - \psi) \chi k_i f f_1 d\mathcal{T} \quad (1.6.4)$$

Efetuada operações análogas nos devidos termos da eq. (1.6.1), tendo em conta que

$$f_1 \frac{\partial f}{\partial x_i} - f \frac{\partial f_1}{\partial x_i} = f f_1 \nabla_i \ln \frac{f}{f_1}, \quad (1.6.5)$$

obtemos

$$\frac{\partial \Psi_D}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\Psi_i + \tilde{\Psi}^I) = S + P^I \quad (1.6.6)$$

que é a equação de transporte I para gases densos, onde

$$\Psi_D = \int \Psi f d\xi$$

é a "densidade" da função  $\psi$  (vide, a título de ilustração a eq. 1.1.2, onde, se introduzirmos no integrando a função  $\psi = m$ , obteremos a densidade expressa pela eq. 1.1.3);

$$\Psi_i = \int \psi c_i f d\xi$$

é o "fluxo cinético" da função  $\psi$ , ou seja, fluxo da função  $\psi$  conseqüente do escoamento do gás;

$$\tilde{\Psi}^I = \frac{a}{2} \int (\psi' - \psi) k_i f f_1 d\pi$$

é o "fluxo potencial" da função  $\psi$ , ou seja, fluxo da função  $\psi$  relativo às colisões inter-atômicas, onde  $\psi' - \psi$  corresponde à variação da função  $\psi$  antes ( $\psi$ ) e depois ( $\psi'$ ) da colisão;

$$S = \int F_i \frac{\partial \psi}{\partial c_i} f d\xi$$

diz respeito à ação de forças externas ao sistema considerado a que chamaremos de "suprimento". Para o nosso caso, será considerada a ação de forças externas, e portanto teremos  $S=0$ ;

$$P^I = P_p + P_c$$

corresponde à "produção", ou seja, à evolução da função  $\psi$  no processo considerado, observando-se duas contribuições distintas que são:

$$P_p = \int \left( \frac{\partial \psi}{\partial t} + c_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right) f d\zeta \quad \text{"produção própria" que é a produção devi-}$$

da ao escoamento do gás;

$$P_c = \int \chi (\psi' - \psi) f f_1 d\pi + \frac{a}{2} \int (\psi' - \psi) \chi k_i \nabla_i \ln \frac{f}{f_1} d\pi + \frac{a}{2} \int \frac{\partial (\psi' - \psi)}{\partial x_i} \chi k_i f f_1 d\pi$$

"produção devida a colisões", ou seja ,  
produção correspondente à função  $\psi$  no que  
tange à sua variação antes ( $\psi$ ) e depois  
( $\psi'$ ) da colisão.

## 1.7 EQUAÇÃO DE TRANSPORTE II

Com o mesmo procedimento adotado na seção anterior, levando o desenvolvimento até os termos de 2ª ordem em  $a$ , obtemos

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int \psi f d\zeta + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \int \psi c_i f d\zeta - \frac{a}{2} \int \psi k_i \chi (f' f_1' + f f_1) d\pi - \frac{a^2}{4} \int \psi \chi k_i k_j \left( f' \frac{\partial f_1'}{\partial x_j} - f_1' \frac{\partial f}{\partial x_j} + \right. \right. \\ & + \left. f_1 \frac{\partial f}{\partial x_j} - f \frac{\partial f_1}{\partial x_j} \right) d\pi + \frac{a^2}{4} \int \frac{\partial \psi}{\partial x_j} \chi k_i k_j (f' f_1' - f f_1) d\pi \Big] = \int \left( \frac{\partial \psi}{\partial t} + c_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i} + F_i \frac{\partial \psi}{\partial c_i} \right) f d\zeta + \\ & + \int \psi \chi (f' f_1' - f f_1) d\pi + \frac{a}{2} \int \psi \chi k_i \left( f' \frac{\partial f_1'}{\partial x_i} - f_1' \frac{\partial f}{\partial x_i} + f \frac{\partial f_1}{\partial x_i} - f_1 \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) d\pi - \\ & - \frac{a}{2} \int \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \chi k_i (f' f_1' - f f_1) d\pi - \frac{a^2}{4} \int \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \chi k_i k_j \left( f' \frac{\partial f_1'}{\partial x_i} - f_1' \frac{\partial f}{\partial x_i} + f_1 \frac{\partial f}{\partial x_i} - f \frac{\partial f_1}{\partial x_i} \right) d\pi - \\ & - \frac{a^2}{4} \int \psi \chi k_i k_j \left( \frac{\partial f'}{\partial x_i} \frac{\partial f_1'}{\partial x_j} - \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial f_1}{\partial x_j} \right) d\pi + \\ & + \frac{a^2}{8} \int \psi \chi k_i k_j \left( f_1' \frac{\partial^2 f'}{\partial x_i \partial x_j} + f' \frac{\partial^2 f_1'}{\partial x_i \partial x_j} - f_1 \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} - f \frac{\partial^2 f_1}{\partial x_i \partial x_j} \right) d\pi + \\ & + \frac{a^2}{4} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \int \psi \chi k_i k_j (f' f_1' - f f_1) d\pi + \frac{a^2}{8} \int \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i \partial x_j} \chi k_i k_j (f' f_1' - f f_1) d\pi, \end{aligned} \quad (1.7.1)$$



onde valem as expressões (1.6.2). Ainda com o mesmo procedimento da seção anterior, obtemos

$$\frac{\partial \Psi_D}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\Psi_i + \tilde{\Psi}_i^{\text{II}}) = S + P^{\text{II}} \quad (1.7.2)$$

que é a equação de transporte II para gases densos, onde

$$\Psi_D = \int \Psi f d\xi \quad (\text{densidade})$$

$$\Psi_i = \int \Psi c_i f d\xi \quad (\text{fluxo cinético})$$

$$\Psi_i^{\text{II}} = \frac{a}{2} \int (\psi' - \psi) \chi_{k_i} f f_1 d\mathcal{T} + \frac{a^2}{4} \int (\psi' - \psi) \chi_{k_i k_j} \nabla_j \ln \frac{f}{f_1} d\mathcal{T} + \frac{a^2}{4} \int \frac{\partial}{\partial x_j} (\psi' - \psi) \chi_{k_i k_j} f f_1 d\mathcal{T} \quad (\text{fluxo potencial})$$

$$S = \int F_i \frac{\partial \Psi}{\partial c_i} f d\xi \quad (\text{suprimento})$$

$$P^{\text{II}} = P_p + P_c^{\text{II}} \quad (\text{produção}), \text{ com}$$

$$P_p = \int \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} + c_i \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \right) f d\xi \quad (\text{produção própria})$$

$$\begin{aligned} P_c^{\text{II}} = & \int (\psi' - \psi) \chi_{k_i} f f_1 d\mathcal{T} + \frac{a}{2} \int (\psi' - \psi) \chi_{k_i k_j} \nabla_j \ln \frac{f}{f_1} d\mathcal{T} + \frac{a}{2} \int \frac{\partial (\psi' - \psi)}{\partial x_i} \chi_{k_i} f f_1 d\mathcal{T} + \\ & + \frac{a^2}{4} \int \frac{\partial (\psi' - \psi)}{\partial x_i} \chi_{k_i k_j} \nabla_j \ln \frac{f}{f_1} d\mathcal{T} - \frac{a^2}{4} \int (\psi' - \psi) \chi_{k_i k_j} \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial f_1}{\partial x_j} d\mathcal{T} + \\ & + \frac{a^2}{8} \int (\psi' - \psi) \chi_{k_i k_j} \left( f_1 \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} + f \frac{\partial^2 f_1}{\partial x_i \partial x_j} \right) d\mathcal{T} + \\ & + \frac{a^2}{8} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \int (\psi' - \psi) \chi_{k_i k_j} f f_1 d\mathcal{T} + \\ & + \frac{a^2}{8} \int \frac{\partial^2 (\psi' - \psi)}{\partial x_i \partial x_j} \chi_{k_i k_j} f f_1 d\mathcal{T} \quad (\text{produção devida a colisões}) \end{aligned}$$

Obviamente, os termos da eq. (1.7.2) têm os mesmos signi

ficados físicos que os termos correspondentes da eq. (1.6.6), Seção 1.6, onde se traça alguns comentários pertinentes ao assunto, comentários esses que não repetiremos aqui.

O motivo pelo qual fazemos a obtenção de duas equações de balanço (uma com desenvolvimento até os termos de ordem  $a$  e outra até  $a^2$ ) será justificado quando tratarmos do assunto referente aos coeficientes de transporte no Capítulo 4.

As equações de transporte I e II nos permitirão obter as equações de balanço I e II ao fazermos a função  $\psi$ , nas equações de transporte, assumir valores adequados aos nossos propósitos de gerar um sistema de equações nos campos básicos a serem definidos no próximo capítulo.

## CAPÍTULO II

### II. TEORIA CINÉTICA DE 13 CAMPOS

Definimos os campos básicos que descrevem o estado macroscópico do gás e obtemos as equações de balanço correspondentes a partir da equação de transporte I.

A função de distribuição  $f$  é obtida pela maximização da entropia, considerando

$$f = f_M (1 + \phi)$$

onde  $f_M$  é a maxwelliana e  $\phi$  o desvio.

Definida a função de distribuição, calculamos os momentos e as produções correspondentes.

#### II.1 CAMPOS BÁSICOS

O estado macroscópico de um gás denso monoatômico simples, constituído por átomos esféricos, perfeitamente rígidos, elásticos e lisos, pode ser descrito pelos 13 campos escalares seguintes: densidade ( $\rho$ ), momento linear ( $\rho v_i$ ), tensor pressão ( $p_{ij}$ ) e fluxo de calor ( $q_i$ ). Estes campos são assim definidos:

(2.1.1)

$$\begin{aligned}
 \rho &= \int m f d\mathbf{c} \\
 \rho v_i &= \int m c_i f d\mathbf{c} \\
 p_{ij} &= \int m C_i C_j f d\mathbf{c} \\
 q_i &= \int \frac{1}{2} m C_i^2 f d\mathbf{c}
 \end{aligned}
 \tag{2.1.1}$$

onde  $C_i$  é a velocidade peculiar já definida em (1.1.5').

Observações:

- i)  $\int m c_i f d\mathbf{c}$  é o correspondente vetor fluxo de massa.
- ii)  $\int m C_i C_j f d\mathbf{c}$  corresponde a três vetores fluxo de momento linear nas direções  $j$ . Os nove componentes  $p_{ij}$  desses vetores constituem o tensor pressão (simétrico de 2.<sup>a</sup> ordem). Os elementos da diagonal principal correspondem a pressões normais,  $p_{ii}$  sendo a força por unidade de área exercida na direção  $i$  em uma superfície plana do gás perpendicular a esta direção. Os elementos não-diagonais correspondem a tensões de cisalhamento,  $p_{ij}$  ( $i \neq j$ ) sendo a força por unidade de área exercida na direção  $i$  em uma superfície plana do gás perpendicular à direção  $j$ .  
A pressão hidrostática (ou simplesmente pressão) é definida como o valor médio das pressões normais através de três planos ortogonais quaisquer:

$$p = \frac{1}{3} p_{ij} \delta_{ij}$$

onde  $\delta_{ij}$  é a componente  $ij$  do tensor unitário de 2.<sup>a</sup> ordem.

iii)  $\int \frac{1}{2} m C_i C^2 \vec{f} d\vec{C}$  é o correspondente vetor fluxo de calor dado pelos seus três componentes cartesianos ( $i = x, y, z$ ).

## II.2 EQUAÇÕES DE BALANÇO I

Os 13 campos escalares definidos na seção anterior exigem, obviamente, 13 equações de balanço. Estas equações são obtidas a partir da equação de transporte I (eq. 1.6.6), onde substituímos sucessivamente  $\psi$  por  $m$ ,  $mc_i$ ,  $mC_i C_j$  e  $\frac{1}{2} m C^2 C_i$ . Desta forma, obtemos:

i) Equação de balanço de massa ( $\psi=m$ )

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i}{\partial x_i} = 0$$

ii) Equação de balanço de momento linear ( $\psi=mc_i$ )

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left( p_{ik} + \rho v_i v_k + \tilde{p}_{ik}^I \right) = 0$$

(2.2.1)

iii) Equação de balanço do tensor pressão ( $\psi=mC_i C_j$ )

$$\frac{\partial p_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left( p_{ijk} + p_{ij} v_k + \tilde{p}_{ijk}^I \right) + \left( p_{jk} + \tilde{p}_{jk}^I \right) \frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \left( p_{ik} + \tilde{p}_{ik}^I \right) \frac{\partial v_j}{\partial x_k} = \tilde{p}_{ij}^I$$

iv) Equação de balanço do fluxo de calor ( $\psi=\frac{1}{2} m C^2 C_i$ )

$$\begin{aligned} \frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left( q_{ik} + q_i v_k + \tilde{q}_{ik}^I \right) + \left( p_{jk} + \tilde{p}_{jk}^I \right) \frac{\partial v_j}{\partial x_k} + \left( q_k + \tilde{q}_k^I \right) \frac{\partial v_i}{\partial x_k} - \\ - \frac{p_{ij}}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_k} \left( p_{jk} + \tilde{p}_{jk}^I \right) - \frac{p_{nn}}{2\rho} \frac{\partial}{\partial x_k} \left( p_{ik} + \tilde{p}_{ik}^I \right) = \tilde{Q}_i^I \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
\tilde{p}_{ik}^I &= \frac{a}{2} \chi \int m (C'_i - C_i) k_k f f_1 d\mathcal{T}, \\
p_{ijk} &= \int m C_i C_j C_k f d\mathcal{E}, \\
\tilde{p}_{ij}^I &= \frac{a}{2} \chi \int m (C'_i C'_j - C_i C_j) k_k f f_1 d\mathcal{T} \\
\tilde{q}_k^I &= \frac{a}{4} \chi \int m (C'^2 - C^2) k_k f f_1 d\mathcal{T} \\
q_{ik} &= \int \frac{m}{2} C^2 C_i C_k f d\mathcal{E} \\
\tilde{q}_{ik}^I &= \frac{a}{4} \chi \int m (C'^2 C'_i - C^2 C_i) k_k f f_1 d\mathcal{T} \\
\tilde{p}_{ij}^I &= \chi \int m (C'_i C'_j - C_i C_j) f f_1 d\mathcal{T} + \frac{a}{2} \chi \int m (C'_i C'_j - C_i C_j) k_k f f_1 \nabla_j \ln \frac{f}{f_1} d\mathcal{T} \\
\tilde{Q}_i^I &= \chi \int \frac{m}{2} (C'^2 C'_i - C^2 C_i) f f_1 d\mathcal{T} + \frac{a}{4} \chi \int m (C'^2 C'_i - C^2 C_i) k_j f f_1 \nabla_j \ln \frac{f}{f_1} d\mathcal{T}
\end{aligned} \tag{2.2.2}$$

A eq.(2.2.1)<sub>1</sub> foi utilizada na obtenção da eq.(2.2.1)<sub>2</sub> e da mesma forma a eq.(2.2.1)<sub>3</sub> na obtenção da eq.(2.2.1)<sub>4</sub>.

São nulos os termos da produção devida a colisões nas eqs.(2.2.1)<sub>1,2</sub> o que já era de se esperar, porque massa e momento linear são grandezas conservativas (estamos tratando do caso de colisões elásticas).  $m$  e  $mc_1$  são invariantes de soma. A energia cinética certamente se enquadra neste caso, ou seja,  $\frac{1}{2} mc^2$  também é um invariante de soma, fato este confirmado pela eq.(4.2.1)<sub>3</sub>.

O uso do til ( $\sim$ ) diz respeito a termos resultantes das colisões entre os átomos.

As eqs.(2.2.1) constituem portanto, um sistema de equações diferenciais em  $\rho$ ,  $v_i$ ,  $p_{ij}$  e  $q_i$ , ou seja, nos 13 campos já

citados. Entretanto, aparecem nestas equações novos campos ( $p_{ijk}$  e  $q_{ik}$ ) e termos de produção ( $\tilde{p}_{ik}^I, \tilde{p}_{ijk}^I, \tilde{p}_{ij}^I, \tilde{q}_{ik}^I, \tilde{q}_i^I$ ) ainda não conhecidos, e que precisam ser calculados. Para tanto, precisamos definir a função de distribuição  $f$ , nosso próximo assunto.

## 2.3 A FUNÇÃO DE DISTRIBUIÇÃO

Para gases próximos ao equilíbrio, a função de distribuição é obtida a partir da densidade de entropia  $\rho\eta$ , buscando-se o seu extremo.<sup>(\*)</sup>  $\rho\eta$  está sujeita aos vínculos (2.2.1) e é definida como

$$\rho\eta = -k \int f \ln f d\zeta \quad (2.3.1)$$

Temos uma situação análoga à da busca do extremo do funcional abaixo que não está sujeito a vínculos:

$$F = \int \left( -k \ln f - \Lambda m - \Lambda_i m c_i - \Lambda_{ij} m c_i c_j - \lambda_i m \frac{c_i^2}{2} \right) f d\zeta, \quad (2.3.2)$$

onde  $\Lambda, \Lambda_i, \Lambda_{ij}$  e  $\lambda_i$  são multiplicadores de Lagrange não dependentes da função de distribuição  $f$ .

Calculamos a derivada da eq. (2.2.2) em relação a  $f$ , igualamos a zero e obtemos a função de distribuição que maximiza a densidade de entropia sujeita aos vínculos (2.1.1):

$$f = \exp \left[ -\frac{m}{k} \left( \frac{k}{m} + \Lambda + \Lambda_i c_i \right) \right] \exp \left[ -\frac{m}{k} \left( \Lambda_i c_i + \Lambda_{ij} c_i c_j + \lambda_i \frac{c_i^2}{2} \right) \right] \quad (2.3.3)$$

---

(\*) Para maiores detalhes vide |06|.

Uma vez que o nosso interesse está voltado para processos próximos ao equilíbrio, a aproximação  $\exp x \approx 1 + x$  pode ser usada para o segundo exponencial em (2.2.3), bem como podemos negligenciar  $\Lambda_i v_i$  no primeiro, pois o nosso objetivo é obter uma função exponencial do tipo  $f = f_M(1 + \phi)$  onde  $f_M$  é uma maxwelliana e  $\phi$  o seu desvio. Assim, temos

$$f = \exp \left[ -\frac{m}{k} \left( \frac{k}{m} + \Lambda + \Lambda_i v_i + \frac{1}{3} \Lambda_{nn} C^2 \right) \right] \left[ 1 - \frac{m}{k} \left( \Lambda_i C_i + \Lambda_{\langle ij \rangle} C_i C_j + \lambda_i \frac{C^2}{2} C_i \right) \right] \quad (2.3.4)$$

Voltamos aos campos definidos em (2.1.1) onde introduzimos a função de distribuição (2.3.4) e calculamos os multiplicadores de Lagrange com o auxílio das eqs. B.1 e B.2 do apêndice B. Levamos esses valores calculados à eq. (2.3.4), negligenciamos os termos não-lineares e obtemos a função de distribuição procurada

$$f = \frac{\rho}{m} \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left( -\frac{m}{2kT} C^2 \right) \left[ 1 + \frac{p_{\langle ij \rangle}}{2\rho} \left( \frac{m}{kT} \right)^2 C_i C_j + \frac{q_i}{\rho} \left( \frac{m}{kT} \right)^2 \left( \frac{m C^2}{5kT} - 1 \right) C_i \right], \quad (2.3.5)$$

chamada de função de distribuição de Grad [07].

É importante notar que na eq. (2.3.4),  $\Lambda_{\langle ij \rangle}$  representa o tensor  $\Lambda_{ij}$  sem traço, ou seja,

$$\Lambda_{\langle ij \rangle} = \Lambda_{ij} - \frac{1}{3} \Lambda_{nn} \delta_{ij} \quad (2.3.6)$$

bem como na eq. (2.3.5),  $p_{\langle ij \rangle}$  representa o deviante do tensor pressão ( $p_{ij}$  sem traço), ou seja,

$$p_{\langle ij \rangle} = p_{ij} - \frac{1}{3} p_{nn} \delta_{ij} \quad (2.3.7)$$



Outra maneira de obter esta função de distribuição seria através da expansão em polinômios de Hermite, o resultando sendo obviamente o mesmo [07]. Uma vez obtida a função de distribuição expressa em termos dos 13 campos básicos definidos na Seção 2.1, podemos partir para o cálculo dos novos campos e termos de produção.

## II.4 DETERMINAÇÃO DOS TERMOS CONSTITUTIVOS

Uma vez obtida a função de distribuição, podemos calcular os novos campos e termos de produção. Os momentos  $p_{ijk}$  e  $q_{ik}$ , bem como as demais integrais relativas às eqs.(2.2.2) são calculáveis a partir da substituição, nestas equações, da função de distribuição  $f$  pelo seu valor expresso na eq.(2.3.5). Dessa forma, obtemos

$$\begin{aligned}
 p_{ijk} &= \frac{2}{5} \left( q_i \delta_{jk} + q_j \delta_{ik} + q_k \delta_{ij} \right), \\
 q_{ik} &= \frac{5}{2} \rho \left( \frac{kT}{m} \right)^2 \delta_{ik} + \frac{7}{2} \frac{kT}{m} p_{\langle ik \rangle}, \\
 \tilde{p}_{ik}^I &= \rho^2 b \chi \frac{kT}{m} \delta_{ik} + \frac{2}{5} \rho b \chi p_{\langle ik \rangle}, \\
 \tilde{p}_{ijk}^I &= \rho b \chi \left( \frac{9}{25} q_i \delta_{jk} + \frac{9}{25} q_j \delta_{ik} + \frac{4}{25} q_k \delta_{ij} \right), \\
 \tilde{q}_k^I &= \frac{3}{5} \rho b \chi q_k, \\
 \tilde{q}_{ik}^I &= \frac{5}{2} \rho^2 b \chi \left( \frac{kT}{m} \right)^2 \delta_{ik} + \frac{17}{10} \rho b \chi \frac{kT}{m} p_{\langle ik \rangle},
 \end{aligned} \tag{2.4.1}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{P}_{ij}^I &= \frac{16}{5} a^2 \chi \left[ \frac{\rho}{m} \left( \frac{kT}{m} \right)^{1/2} p_{ij} + \frac{6}{5} \rho^2 b \chi \frac{kT}{m} \frac{\partial v_{zi}}{\partial x_j} + \frac{6}{25} \rho b \chi \frac{\partial q_{ji}}{\partial x_j} \right], \\
\tilde{Q}_i^I &= -\frac{32}{15} a^2 \chi \left[ \frac{\rho}{m} \left( \frac{kT}{m} \right)^{1/2} q_i + \rho^2 b \chi \left( \frac{kT}{m} \right)^{1/2} \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i} + \frac{1}{10} \rho b \chi \frac{kT}{m} \frac{\partial p_{kik}}{\partial x_k} \right]. \quad (2.4.1)
\end{aligned}$$

Note-se que os novos campos e termos de produção estão expressos em função dos campos básicos já definidos.

O apêndice B traz maiores detalhes sobre o cálculo das integrais.

Observação:  $b = \frac{2}{3} \pi \frac{a^3}{m}$ .

### CAPÍTULO III

#### III. PROPAGAÇÃO DE ONDAS HARMÔNICAS PLANAS LONGITUDINAIS NA TEORIA DOS 13 CAMPOS ESCALARES

Inicialmente, a partir das equações de balanço I, obtemos um sistema de equações de campo linearizadas. Busca-se uma solução para este sistema no caso de propagação de ondas harmônicas planas longitudinais de pequena amplitude. Tal solução nos leva à relação de dispersão, relação esta que nos permite tirar algumas conclusões a respeito da velocidade de fase e do coeficiente de atenuação.

##### III.1 EQUAÇÕES DE CAMPO LINEARIZADAS

Ao substituírmos os valores dos termos constitutivos (eqs.2.4.1) nas equações de balanço I (eqs.2.2.1), negligenciando os termos não lineares em  $v_i$ ,  $p_{<ij>}$ ,  $q_i$ ,  $\partial \rho / \partial x_i$ ,  $\partial v_i / \partial x_j$ ,  $\partial T / \partial x_j$ , e suas derivadas, obtemos as equações de campo linearizadas para os 13 campos  $\rho$ ,  $T$ ,  $v_i$ ,  $p_{<ij>}$  e  $q_i$ , que são:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3.1.1)$$

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} + \left(1 + \frac{2}{5} \rho b_k\right) \frac{\partial p_{<ik>}}{\partial x_i} + \frac{kT}{m} \left(1 + 2\rho b_k + \rho^2 b_k \frac{\partial}{\partial \rho}\right) \frac{\partial \rho}{\partial x_i} + \frac{k}{m} \rho \left(1 + \rho b_k\right) \frac{\partial T}{\partial x_i} = 0,$$

$$\begin{aligned}
\frac{3}{2}\rho \frac{k}{m} \frac{\partial T}{\partial t} + \left(1 + \frac{3}{5}\rho b\chi\right) \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \rho \frac{kT}{m} \left(1 + \rho b\chi\right) \frac{\partial v_i}{\partial x_i} &= 0, \\
\frac{\partial p_{\langle ij \rangle}}{\partial t} + \left(\frac{4}{5} + \frac{12}{25}\rho b\chi\right) \frac{\partial q_i}{\partial x_j} + \left(2\rho \frac{kT}{m} + \frac{4}{5}\rho^2 b\chi \frac{kT}{m}\right) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} &= -\frac{16}{5} \alpha^2 \chi \rho \left(\frac{k\pi T}{m}\right)^{1/2} p_{\langle ij \rangle}, \\
\frac{\partial q_i}{\partial t} + \left(\frac{5}{2} + \frac{3}{2}\rho b\chi\right) \left(\frac{k}{m}\right)^2 T \frac{\partial T}{\partial x_i} + \left(1 + \frac{3}{5}\rho b\chi\right) \frac{kT}{m} \frac{\partial p_{\langle ij \rangle}}{\partial x_i} &= -\frac{32}{15} \alpha^2 \chi \rho \left(\frac{k\pi T}{m}\right)^{1/2} q_i
\end{aligned}
\tag{3.1.1}$$

onde as eqs.(3.1.1)<sub>3,4</sub> representam, respectivamente, o traço e a parte sem traço da eq.(2.2.1)<sub>3</sub>.

A seguir, analisaremos uma solução deste sistema de equações diferenciais parciais (eqs.3.1.1) para o caso de propagação de ondas harmônicas planas longitudinais de pequena amplitude.

### III.2 PROPAGAÇÃO DE ONDAS HARMÔNICAS PLANAS LONGITUDINAIS

Nosso objetivo nesta seção é a busca de uma solução para o sistema de equações diferenciais parciais (eqs.3.1.1), solução esta correspondente à propagação de ondas harmônicas planas longitudinais de pequena amplitude. Estas ondas são definidas de tal forma que, no equilíbrio,

$$\begin{aligned}
\tilde{\rho} &= \text{constante}, & \tilde{T} &= \text{constante}, & \tilde{v}_i &= 0 \\
\tilde{p}_{\langle ij \rangle} &= 0, & \tilde{q}_i &= 0,
\end{aligned}
\tag{3.2.1}$$

e fora do equilíbrio,

$$\rho = \tilde{\rho} + \bar{\rho} e^{i(\omega t - kx)}, \quad T = \tilde{T} + \bar{T} e^{i(\omega t - kx)}, \quad v_x = \bar{v} e^{i(\omega t - kx)} \tag{3.2.2}$$

$$p_{xx} = \bar{p} e^{i(\omega t - k^c x)}, \quad q_x = \bar{q} e^{i(\omega t - k^c x)}. \quad (3.2.2)$$

Estamos considerando somente o caso uni-dimensional , com a propagação de onda na direção do eixo x, o que não provoca perda de generalidade. Nas eqs. (3.2.2), as amplitudes  $\bar{p}$ ,  $\bar{T}$ ,  $\bar{v}$ ,  $\bar{p}$  e  $\bar{q}$  são consideradas pequenas, sendo negligenciável o produto entre duas (ou mais) delas. A frequência é representada por  $\omega$ , e o número de onda por  $k^c = k^r + i k^i$ , onde  $\alpha = -k^i$  é a atenuação. A velocidade de fase é dada por

$$v_f = \frac{\omega}{k^r}. \quad (3.2.3)$$

Então, levando as eqs. (3.2.2) às eqs. (3.1.1), obtemos o seguinte sistema:

$$\omega \bar{p} - k^c \tilde{\rho} \bar{v} = 0,$$

$$k^c \frac{k T}{m} \left( 1 + 2 \tilde{\rho} b_k + \tilde{\rho}^2 b \frac{\partial k}{\partial \rho} \right) \bar{p} + k^c \frac{k}{m} (\tilde{\rho} + \tilde{\rho}^2 b_k) \bar{T} - \omega \tilde{\rho} \bar{v} - k^c \left( 1 + \frac{2}{5} \tilde{\rho} b_k \right) \bar{p} = 0,$$

$$\frac{3}{2} \omega \tilde{\rho} \frac{k}{m} \bar{T} - k^c \tilde{\rho} \frac{k \bar{T}}{m} \left( 1 + \tilde{\rho} b_k \right) \bar{v} - k^c \left( 1 + \frac{3}{5} \tilde{\rho} b_k \right) \bar{q} = 0, \quad (3.2.4)$$

$$k^c \tilde{\rho} \frac{k \tilde{T}}{m} \left( \frac{4}{3} + \frac{8}{15} \tilde{\rho} b_k \right) \bar{v} - \left( \omega - i \frac{3}{2} \tilde{\rho} B_k \right) \bar{p} + k^c \left( \frac{8}{15} - \frac{8}{25} \tilde{\rho} b_k \right) \bar{q} = 0,$$

$$k^c \tilde{\rho} \left( \frac{k}{m} \right)^2 \tilde{T} \left( \frac{5}{2} + \frac{3}{2} \tilde{\rho} b_k \right) \bar{T} + k^c \frac{k \tilde{T}}{m} \left( 1 + \frac{3}{5} \tilde{\rho} b_k \right) \bar{p} - \left( \omega - i \tilde{\rho} B_k \right) \bar{q} = 0,$$

onde  $B = \frac{32}{15} \frac{a^2}{m} \left( \frac{k \Pi T}{m} \right)^{1/2}$ . Temos portanto, um sistema de equações

lineares homogêneo para as amplitudes  $\bar{\rho}$ ,  $\bar{v}$ ,  $\bar{T}$ ,  $\bar{p}$  e  $\bar{q}$ . Este sistema admite uma solução trivial somente se o determinante correspondente for nulo, solução esta que fornece a relação entre a frequência  $\omega$  e o número de onda  $k^c$ . Tal relação, chamada de relação de dispersão, é expressa na forma

$$(A + iB)T^4 + (C + iD)T^2 + (E + iF) = 0, \quad (3.2.5)$$

onde

$$A = \frac{27}{25} + \frac{72}{25}\rho^*\chi + \frac{1431}{625}\rho^{*2}\chi^2 + \frac{1782}{3125}\rho^{*3}\chi^3 + \rho^*\frac{\partial\chi}{\partial\rho^*}\left(\frac{99}{125} + \frac{594}{625}\rho^*\chi + \frac{891}{3125}\rho^{*2}\chi^2\right),$$

$$B = -r\chi\left[\frac{48}{25} + \frac{768}{125}\rho^*\chi + \frac{3312}{625}\rho^{*2}\chi^2 + \frac{864}{625}\rho^{*3}\chi^3 + \rho^*\frac{\partial\chi}{\partial\rho^*}\left(\frac{48}{25} + \frac{288}{125}\rho^*\chi + \frac{432}{625}\rho^{*2}\chi^2\right)\right],$$

$$C = \frac{78}{25} + \frac{528}{125}\rho^*\chi + \frac{627}{625}\rho^{*2}\chi^2 + \frac{3}{5}\rho^*\frac{\partial\chi}{\partial\rho^*} + r\chi^2\left(\frac{512}{75} + \frac{1024}{75}\rho^*\chi + \frac{1024}{375}\rho^{*2}\chi^2 + \frac{512}{125}\rho^*\frac{\partial\chi}{\partial\rho^*}\right),$$

$$D = r\chi\left(\frac{256}{25} + \frac{1984}{125}\rho^*\chi + \frac{2224}{625}\rho^{*2}\chi^2 + \frac{16}{5}\rho^*\frac{\partial\chi}{\partial\rho^*}\right),$$

$$E = 1 - \frac{512}{75}r\chi^2,$$

$$F = -\frac{16}{3}r\chi.$$

Nas expressões acima foi introduzida a seguinte notação:

$$\rho^* = \rho b, \quad T = \frac{k^c}{\omega} \left( \frac{5k\tilde{T}}{3m} \right)^{1/2} = \frac{k^c}{\omega} v(0), \quad r = \frac{15}{32} \beta \frac{\tilde{p}}{\omega}. \quad (3.2.6)$$

O fator  $\chi$  que aparece na relação de dispersão (eq.3.2.5) é o mesmo da Seção 1.5 (introduzido ao se levar em conta que o aumento da densidade diminui o volume "livre" aos átomos do gás). Portanto, para gases ideais,  $\chi = 1$ , aumentando de valor à medida em que aumenta a densidade, tendendo ao infinito quan-

do o gás se aproxima do estado em que os átomos ficam tão próximos uns dos outros que o seu movimento se torna impossível.

$\chi$  será expresso pela série

$$\chi = 1 + \frac{5}{8}\rho^* + 0,28695\rho^{*2} + 0,1103\rho^{*3} + 0,0386\rho^{*4} + 0,0138\rho^{*5} + \dots \quad (3.2.8)$$

cujos coeficientes são os "coeficientes viriais para esferas rígidas". No apêndice B mostramos o procedimento de cálculo para a determinação do fator  $\chi$  até o termo de 1.<sup>a</sup> ordem em  $\rho^*$ , sendo que os demais termos têm sido calculados através de métodos numéricos [08] e [09].

Com o auxílio da análise numérica podemos adotar uma representação mais precisa para  $\chi$ . Utilizando o Método dos Aproximantes de Padê [10] representamos a série virial como um quociente de dois polinômios cujos coeficientes são calculados pela expansão deste quociente numa série de potências, impondo-se aos seus  $n$  primeiros termos a correspondência aos  $n$  primeiros coeficientes da própria função expandida em série de Taylor. Seguindo este procedimento, obtemos

$$\chi = \frac{1 + 0,3519\rho^* + 0,0867\rho^{*2} + 0,1347\rho^{*3}}{1 - 0,2731\rho^* - 0,0295\rho^{*2}}, \quad (3.2.9)$$

expressão esta que levamos à relação de dispersão, cuja solução pode ser facilmente obtida para  $\Gamma$ . Desta solução, obtemos a velocidade de fase  $v_f$  e o coeficiente de atenuação  $\alpha = -k_i$  como funções de  $1/r$  e  $\rho^*$  (vide Fig. 3.2.1).

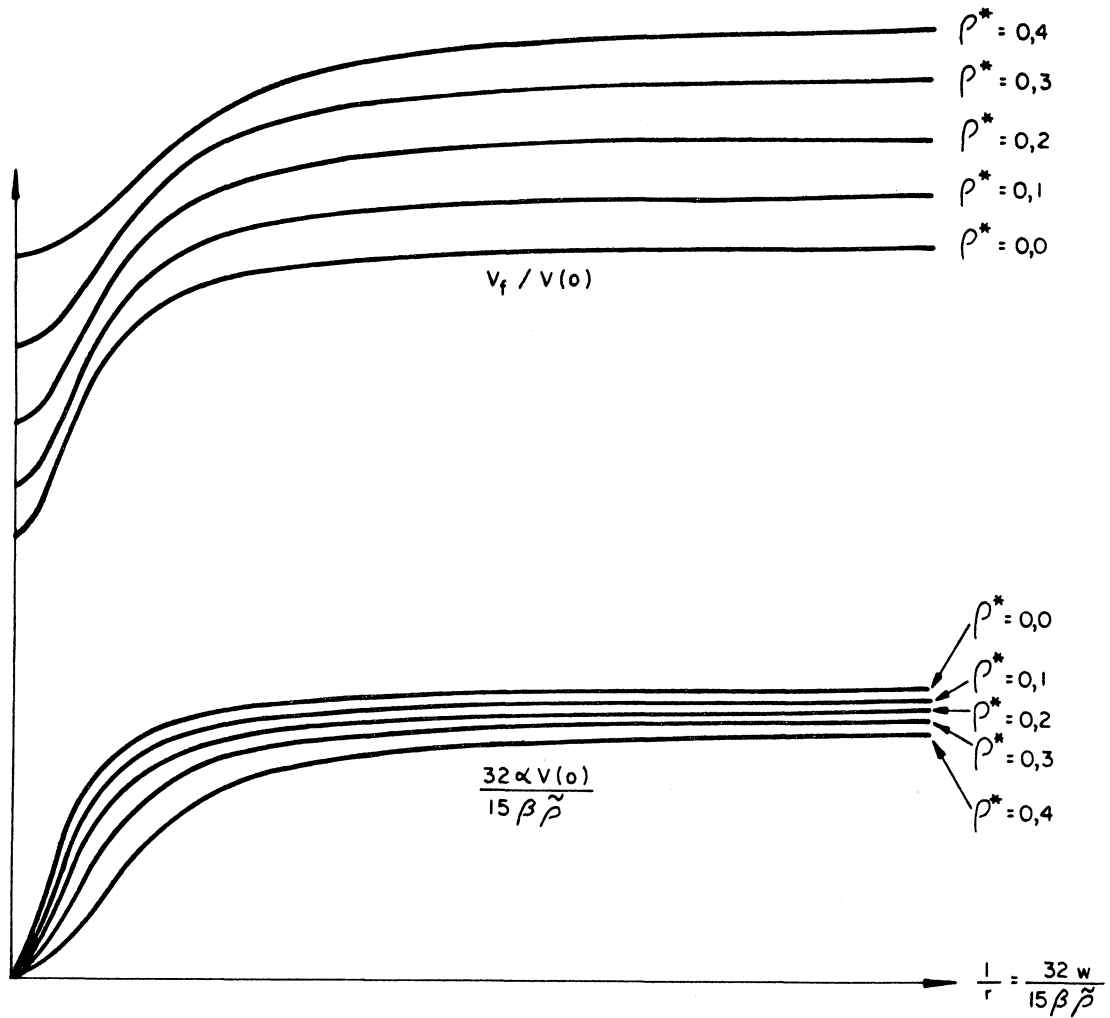


Fig. 3.2.1 - Velocidades de fase e coeficiente de atenuação de acordo com a teoria dos 13 campos.

Pode-se observar pela Fig. 3.2.1, bem como da relação de dispersão (eq. 3.2.5), que o valor máximo da velocidade de fase (para  $w \rightarrow \infty$ ) é um valor finito. Esta constatação é importante porque o fato de a velocidade máxima de fase ter valor finito evita o paradoxo da condução de calor descrito na Seção 5.2.

Para pequenos valores de  $w$ , a velocidade de fase tende para a velocidade adiabática do som no gás dada por

$$v_s = \left[ \frac{kT}{m} \left( \frac{5}{3} + \frac{10}{3}\rho^* \chi + \frac{2}{3}\rho^{*2} \chi^2 + \rho^{*2} \frac{\partial \chi}{\partial \rho^*} \right) \right]^{1/2}. \quad (3.2.10)$$



## CAPÍTULO IV

### IV.      TEORIA CINÉTICA DE 5 CAMPOS ESCALARES

Uma vez definidos os 5 campos  $\rho$  (densidade),  $v_i$  (velocidade) e  $T$  (temperatura), partimos para a obtenção das equações de balanço correspondentes. Diferentemente do caso da teoria de 13 campos (onde fizemos o desenvolvimento até os termos de ordem  $a$  na equação de transporte I), consideraremos a equação de transporte II (com desenvolvimento até os termos de ordem  $a^2$ ). Isto é feito porque estamos interessados em termos constitutivos que contenham gradientes de velocidade e de temperatura para posterior relacionamento com as leis de Navier-Stokes e de Fourier. Desta forma, obtemos os coeficientes de viscosidade volumétrica, de viscosidade cizalhante e de condutividade térmica.

#### 4.1      CAMPOS BÁSICOS

Como já foi visto no Capítulo 3, a Teoria Cinética de 13 campos fornece velocidades de onda finitas quando  $w \rightarrow \infty$ , o que sem dúvida a valoriza. Entretanto, é usual a utilização de equações com os 5 campos já definidos anteriormente  $\rho$  (densidade),  $v_i$  (velocidade) e  $T$  (temperatura) para representar o estado termodinâmico de um sistema. Façamos então o desenvolvimento de uma teoria que utilize as cinco equações correspondentes aos cinco campos citados.

## 4.2 EQUAÇÕES DE BALANÇO II

As 5 equações de balanço correspondentes aos campos  $\rho$ ,  $v_i$  e  $T$  são obtidas a partir da equação de transporte II (eq. 1.7.2) onde sucessivamente substituímos  $\psi$  por  $m$ ,  $mc_i$  e  $\frac{1}{2}mc^2$ . Assim, temos:

i) Equação de balanço de massa ( $\psi = m$ )

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i}{\partial x_i} = 0,$$

ii) Equação de balanço de momento linear ( $\psi = mc_i$ )

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left( p_{ik} + \rho v_i v_k + \tilde{p}_{ik}^{\Pi} \right) = 0, \quad (4.2.1)$$

iii) Equação de balanço de energia ( $\psi = \frac{1}{2} mc^2$ )

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho \left( \epsilon + \frac{1}{2} v^2 \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \rho \left( \epsilon + \frac{1}{2} v^2 \right) v_k + \left( p_{ik} + \tilde{p}_{ik}^{\Pi} \right) v_i + q_k - \tilde{q}_k^{\Pi} \right] = 0,$$

onde  $\epsilon = \frac{3}{2} \frac{kT}{m}$ , e os termos constitutivos são

$$\begin{aligned} \tilde{p}_{ik}^{\Pi} &= \tilde{p}_{ik}^I + \frac{a^2}{4} \chi \int m (C'_i - C_i) \frac{p_i}{f_1} \nabla_j \ln \frac{f}{f_1} k_j k_k d\pi, \\ \tilde{q}_k^{\Pi} &= \tilde{q}_k^I + \frac{a^2}{8} \chi \int m (C'^2 - C^2) k_j k_k \frac{p_j}{f_1} \nabla_j \ln \frac{f}{f_1} d\pi. \end{aligned} \quad (4.2.2)$$

Nas eqs. (4.2.1) não há termos de produção, o que já esperávamos, pois conforme comentado na Seção 2.2, as grandezas massa, momento linear e energia são invariantes de soma.

Consideramos os termos constitutivos com desenvolvimento até os termos de ordem  $a^2$  porque observando as eqs.(4.2.2), notamos que aparece nos termos de ordem  $a^2$  de  $\tilde{p}_{ik}^{II}$  e  $\tilde{q}_k^{II}$ , o fator  $v_j \ln \frac{f}{f_1}$ . Como a função de distribuição  $f$  é expressa em termos dos campos básicos, é de se esperar que surjam daí gradientes desses mesmos campos básicos. Isto nos permitirá identificar as leis de Navier-Stokes e de Fourier, expressas em termos de gradientes de velocidade e de temperatura, e obter os coeficientes de transporte.

### 4.3 DETERMINAÇÃO DOS TERMOS CONSTITUTIVOS

Para o cálculo dos termos constitutivos  $\tilde{p}_{ik}^{II}$  e  $\tilde{q}_k^{II}$ , seguimos o mesmo procedimento adotado na Seção 2.4, ou seja, nas eqs.(4.2.2) substituímos o valor da função de distribuição expresso pela eq.(2.3.5), e procedemos ao cálculo das integrais (ver apêndice B). Assim procedendo, obtemos

$$\begin{aligned}\tilde{p}_{ik}^{II} &= \rho^2 b \chi \frac{kT}{m} \delta_{ik} + \frac{2}{5} \rho b \chi p_{\langle ik \rangle} - \frac{\rho^2 b^2}{a^2} \chi \left( \frac{mkT}{\pi^3} \right)^{1/2} \left( \frac{6}{5} \frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \delta_{ik} \right), \\ \tilde{q}_k^{II} &= \frac{3}{5} \rho b \chi q_k - \frac{\rho^2 b \chi}{T^{1/2}} \left( \frac{kT}{m} \right)^{3/2} \left( \frac{\rho}{T} \frac{\partial T}{\partial x_k} \right)\end{aligned}\quad (4.3.1)$$

Nestas equações não consideramos os gradientes de  $p_{\langle ik \rangle}$  e de  $q_i$  pois os mesmos nos levariam a equações constitutivas com gradientes de segunda ordem dos campos básicos  $\rho$ ,  $v_i$  e  $T$ .

### 4.4 COEFICIENTES DE TRANSPORTE

O tensor pressão  $p_{ik}$ , definido na Seção 2.1 como

$$p_{ik} = \int m C_i C_j f d\mathbf{c} \quad (4.4.1)$$

diz respeito à transferência de momento linear devida ao escoamento do gás. A transferência de momento linear devida a colisões é expressa pelo tensor  $\tilde{p}_{ik}^{II}$ , definido na Seção 4.2 como

$$\tilde{p}_{ik}^{II} = \frac{a}{2} \int m (C'_i - C_j) k_k f f_1 d\mathcal{T} + \frac{a^2}{4} \int m (C'_i - C_j) f f_1 \nabla_j \ln \frac{f}{f_1} k_j k_k d\mathcal{T} \quad (4.4.2)$$

Dessa forma, a transferência total de momento linear, isto é, a soma da transferência devida ao escoamento do gás com a transferência devida a colisões pode ser expressa por

$$\mathcal{P}_{ik} = p_{ik} + \tilde{p}_{ik}^{II}. \quad (4.4.3)$$

Tendo em conta a eq. (2.3.7) e a eq. (4.3.1)<sub>1</sub>, podemos escrever

$$\mathcal{P}_{ik} = \frac{\rho k T}{m} \left( 1 + \rho b_k \right) \delta_{ik} + \left( 1 + \frac{2}{5} \rho b_k \right) p_{<ik>} - \frac{\rho b_k^2}{a^2} \left( \frac{m k T}{\pi^3} \right)^{1/2} \frac{\partial v_{<ik>}}{\partial x_k} - \frac{6}{5} \frac{\rho b_k^2}{a^2} \left( \frac{m k T}{\pi^3} \right)^{1/2} \frac{\partial v_{<i>}}{\partial x_k}. \quad (4.4.4)$$

Buscando expressar  $p_{<ik>}$  em termos de  $\frac{\partial v_{<i>}}{\partial x_k}$ , voltamos à eq. (3.1.1)<sub>4</sub> onde fazemos um tipo de iteração maxwelliana. Esta iteração consiste em substituir, no primeiro membro da equação, os valores de  $p_{<ik>}$  e de  $q_i$  pelos seus correspondentes valores de equilíbrio  $p_{<ik>}^{(0)}$  e  $q_i^{(0)}$  (ambos nulos), e obter no segundo membro da equação o valor  $p_{<ik>}^{(1)}$  que é primeiro valor da iteração. Assim, obtemos

$$p_{<ik>}^{(1)} = - \frac{m}{\pi a^2 k} \left( \frac{k \pi T}{m} \right)^{1/2} \left( \frac{5}{8} + \frac{1}{4} \rho b_k \right) \frac{\partial v_{<i>}}{\partial x_k}, \quad (4.4.5)$$

expressão esta que levada à eq. (4.4.4) fornece

$$\mathcal{P}_{ik} = \mathcal{P} \delta_{ik} - \eta \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - 2\mu \frac{\partial v_{ki}}{\partial x_k}, \quad (4.4.6)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{P} &= \frac{\rho k T}{m} (1 + \rho b_k) \\ \eta &= \frac{\rho^2 b_k^2}{a^2} \left( \frac{m k T}{\pi^3} \right)^{1/2} \\ \mu &= \frac{5}{16} \left( \frac{m k T}{\pi} \right)^{1/2} \frac{1}{a^2} \left[ 1 + \frac{4}{5} \rho b_k + \left( \frac{4}{25} + \frac{48}{25\pi} \right) \rho^2 b_k^2 \right] \end{aligned} \quad (4.4.7)$$

Comparando a eq. (4.4.6) com a equação de Navier-Stokes, podemos facilmente concluir que  $\eta$  é o coeficiente de viscosidade volumétrica, enquanto  $\mu$  é o coeficiente de viscosidade cizalhante.

O vetor fluxo de calor  $q_k$ , definido na Seção 2.1 como

$$q_k = \int \frac{1}{2} m C^2 C_k f d\mathbf{c} \quad (4.4.8)$$

diz respeito à transferência de energia devida ao escoamento do gás. A transferência de energia devida a colisões é expressa pelo vetor  $\tilde{q}_k^{II}$ , definido na Seção 4.2 como

$$\tilde{q}_k^{II} = \frac{a}{4} \int m (C'^2 - C^2) C_k f f_1 d\mathbf{p} + \frac{a^2}{8} \int m (C'^2 - C^2) C_j C_k f f_1 \nabla_j \ln \frac{f}{f_1} d\mathbf{p}. \quad (4.4.9)$$

Assim, a transferência total de energia, ou seja, a soma dos dois tipos de transferência acima citados, é igual a

$$Q_k = q_k + \tilde{q}_k^{II}. \quad (4.4.10)$$

Considerando o valor já calculado de  $\tilde{q}_k^{II}$  (eq. 4.3.1), podemos es

crever

$$Q_k = \left(1 + \frac{3}{5} \rho b_k\right) q_k - \frac{\alpha \rho^2 b_k}{\pi^{1/2}} \left(\frac{kT}{m}\right)^{3/2} \frac{\rho}{T} \frac{\partial T}{\partial x_k}. \quad (4.4.11)$$

Nesta expressão, nos interessa expressar  $q_k$  em termos de  $\frac{\partial T}{\partial x_k}$ . Para tanto, fazemos um tipo de iteração maxwelliana [11] na eq. (3.1.1)<sub>5</sub>, ou seja, no seu primeiro membro substituímos  $p_{<ik>}$  e  $q_k$  pelos seus respectivos valores no equilíbrio  $p_{<ik>}^{(0)}$  e  $q_k^{(0)}$  (ambos nulos), obtendo no segundo membro o valor  $q_k^{(1)}$ , correspondente ao valor da primeira iteração:

$$q_k^{(1)} = -\frac{1}{\alpha^2 k} \left(\frac{k^3 T}{m \pi}\right)^{1/2} \left(\frac{75}{64} + \frac{45}{64} \rho b_k\right) \frac{\partial T}{\partial x_k}. \quad (4.4.12)$$

Levando esta expressão à eq. (4.4.11), obtemos

$$Q_k = -\frac{75}{64} \left(\frac{k^3 T}{m \pi}\right)^{1/2} \frac{1}{\alpha^2 k} \left[1 + \frac{6}{5} \rho b_k + \left(\frac{9}{25} + \frac{32}{25\pi}\right) \rho^2 b_k^2\right] \frac{\partial T}{\partial x_k}. \quad (4.4.13)$$

Esta equação representa a lei de Fourier, onde o coeficiente de condutividade térmica vale

$$\lambda = \frac{75}{64} \left(\frac{k^3 T}{m \pi}\right)^{1/2} \frac{1}{\alpha^2 k} \left[1 + \frac{6}{5} \rho b_k + \left(\frac{9}{25} + \frac{32}{25\pi}\right) \rho^2 b_k^2\right] \quad (4.4.14)$$

É importante ressaltar que os resultados obtidos para os coeficientes de viscosidade (volumétrica e cizalhante) e de condutividade térmica (eqs. 4.4.7<sub>2,3</sub> e 4.4.14) são os mesmos obtidos pelo método de Chapman-Enskog [01].

## CAPÍTULO V

### V. PROPAGAÇÃO DE ONDAS HARMÔNICAS PLANAS LONGITUDINAIS NA TEORIA DOS 5 CAMPOS ESCALARES

Partimos das equações de balanço II e obtemos um sistema de equações de campo linearizadas para os 5 campos  $\rho$ ,  $v_i$  e  $T$ . A solução deste sistema, para o caso de propagação de ondas harmônicas planas longitudinais de pequena amplitude nos leva a uma relação de dispersão, relação esta que nos permitirá chegar a algumas conclusões sobre a velocidade de fase e o coeficiente de atenuação. Em suma, trata-se de um procedimento análogo ao adotado no Capítulo 3. Entretanto, chega-se a resultados diversos dos obtidos naquele capítulo, tornando-se interessante a comparação desses resultados.

#### 5.1 EQUAÇÕES DE CAMPO LINEARIZADAS

As equações de balanço II (eqs. 4.2.1) com os termos constitutivos (eqs. 4.3.1), negligenciando os termos não lineares em  $\frac{\partial \rho}{\partial x_i}$ ,  $v_i \frac{\partial T}{\partial x_i}$  e suas derivadas, fornecem as seguintes equações de campo linearizadas para os 5 campos  $\rho$ ,  $v_i$  e  $T$ :

(5.1.1)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial v_i}{\partial x_i} &= 0, \\ \rho \frac{\partial v_i}{\partial t} - \left[ \frac{1}{d_k^2} \left( \frac{mkT}{\pi} \right)^{1/2} \left( \frac{5}{8} + \frac{1}{2} \rho b_k + \frac{1}{10} \rho^2 b_k^2 \right) + \frac{6}{5} \left( \frac{mkT}{\pi^3} \right)^{1/2} \frac{\rho^2 b_k^2}{d_k^2} \right] \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_k} \right) + \frac{kT}{m} \left( 1 + 2\rho b_k + \rho^2 b_k^2 \right) \frac{\partial \rho}{\partial x_i} + \frac{\rho k}{m} \left( 1 + \rho b_k \right) \frac{\partial T}{\partial x_i} &= 0, \\ \frac{3}{2} \frac{kT}{m} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{3}{2} \frac{\rho k}{m} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\rho k T}{m} \left( \frac{5}{2} + \rho b_k \right) \frac{\partial v_k}{\partial x_k} - \frac{75}{64} \left( \frac{k^3 T}{m \pi} \right)^{1/2} \frac{1}{d_k^2} \left[ 1 + \frac{6}{5} \rho b_k + \left( \frac{9}{25} + \frac{32}{25 \pi} \right) \rho^2 b_k^2 \right] \frac{\partial^2 T}{\partial x_k^2} &= 0, \end{aligned} \quad (5.1.1)$$

equações estas que correspondem, na teoria de 13 campos, às eqs. (3.1.1).

## 5.2 PROPAGAÇÃO DE ONDAS HARMÔNICAS PLANAS

Para o sistema de equações diferenciais parciais (5.1.1) estamos buscando a solução correspondente à propagação de ondas harmônicas planas longitudinais de pequena amplitude. Estas são definidas de tal forma que no equilíbrio,

$$\bar{\rho} = \text{constante}, \quad \bar{v}_i = 0, \quad \bar{T} = \text{constante}, \quad (5.2.1)$$

e fora do equilíbrio

$$\rho = \bar{\rho} + \tilde{\rho} e^{i(\omega t - k^c x)}, \quad T = \bar{T} + \tilde{T} e^{i(\omega t - k^c x)}, \quad v_x = \bar{v} e^{i(\omega t - k^c x)}. \quad (5.2.2)$$

Semelhantemente ao procedimento adotado na Seção 3.2, sô consideraremos o caso uni-dimensional, com a propagação na direção do eixo  $x$ , sem perda da generalidade. As amplitudes  $\bar{\rho}$ ,  $\bar{T}$  e  $\bar{v}$  são consideradas pequenas, com o produto entre duas (ou mais) delas negligenciável.  $\omega$  é a frequência e  $k^c = k^r + ik^i$  o número de onda. A velocidade de fase e o coeficiente de atenuação são



dados, respectivamente, por

$$v_f = \frac{\omega}{k^n}, \quad \alpha = -k^c. \quad (5.2.3)$$

Levando (5.2.2) às eqs.(5.1.1), temos

$$\omega \bar{\rho} - \tilde{\rho} k^c \bar{v} = 0,$$

$$\left(1 + 2\tilde{\rho} b_k + \tilde{\rho}^2 b_k \frac{\partial \chi}{\partial \tilde{\rho}}\right) \frac{k \tilde{T}}{m} k^c \bar{\rho} - \left[ \omega \tilde{\rho} + i \left(1 + \frac{4}{5} \tilde{\rho} b_k + \left(\frac{4}{25} + \frac{88}{25\pi}\right) \tilde{\rho}^2 b_k^2\right) \frac{10}{16} \left(\frac{m k T}{\pi}\right)^{1/2} \frac{(k^c)^2}{a^2 k} \right] \bar{v} + \left(1 + \tilde{\rho} b_k\right) k^c \tilde{\rho} \frac{\partial \chi}{m} \bar{T} = 0, \quad (5.2.4)$$

$$\frac{3}{2} \frac{k \tilde{T}}{m} \omega \bar{\rho} - \left(\frac{5}{2} + \tilde{\rho} b_k\right) \tilde{\rho} k \frac{\partial \chi}{m} k^c \bar{v} + \left[\frac{3}{2} \tilde{\rho} k \omega - i \frac{75}{64} \left(\frac{k^3 T}{m \pi}\right)^{1/2} \left(1 + \frac{6}{5} \tilde{\rho} b_k + \left(\frac{9}{25} + \frac{32}{25\pi}\right) \tilde{\rho}^2 b_k^2\right) (k^c)^2\right] \bar{T} = 0.$$

Desta forma, obtemos um sistema de equações lineares homogêneo para as amplitudes  $\bar{\rho}$ ,  $\bar{v}$  e  $\bar{T}$ . Este sistema admite uma solução trivial se for nulo o determinante correspondente e desta forma chegamos a uma relação entre  $\omega$  e  $k^c$ , chamada relação de dispersão:

$$(A + iB) T^4 + (C + iD) T^2 + (E + iF) = 0 \quad (5.2.5)$$

onde

$$A = \frac{135}{512} + \frac{135}{256} \rho^* k + \left(\frac{999}{2560} + \frac{81}{64\pi}\right) \rho^{*2} k^2 + \left(\frac{81}{640} + \frac{1107}{160\pi}\right) \rho^{*3} k^3 + \left(\frac{243}{16000} + \frac{621}{160\pi} + \frac{297}{250\pi^2}\right) \rho^{*4} k^4,$$

$$B = -\pi k \left[ \frac{27}{64} + \frac{27}{20} \rho^* k + \left(\frac{1863}{1600} + \frac{27}{50\pi}\right) \rho^{*2} k^2 + \left(\frac{243}{800} + \frac{27}{25\pi}\right) \rho^{*3} k^3 + \left(\frac{27}{64} + \frac{81}{160} \rho^* k + \left(\frac{243}{1600} + \frac{27}{50\pi}\right) \rho^{*2} k^2\right) \rho^* \frac{\partial \chi}{\partial \rho^*} \right],$$

$$C = \pi k^2 \left( \frac{3}{2} + 3 \rho^* k + \frac{3}{5} \rho^{*2} k^2 + \frac{9}{10} \rho^* \frac{\partial \chi}{\partial \rho^*} k \right),$$

$$D = \eta k \left[ \frac{81}{64} + \frac{207}{160} \rho^* k + \left( \frac{549}{1600} + \frac{72}{25\pi} \right) \rho^{*2} k^2 \right]$$

$$E = -\frac{3}{2} \eta^2 k^2$$

$$F = 0$$

Nas expressões acima foi introduzida a seguinte notação:

$$\rho^* = \rho b, \quad \mathcal{T} = \frac{k^c}{\omega} \left( \frac{5k\tilde{T}}{3m} \right)^{1/2} = \frac{k^c}{\omega} v(0), \quad \eta = \left( \frac{a^4 k \tilde{T}}{m^3} \right)^{1/2} \frac{\tilde{\rho}}{\omega}. \quad (5.2.6)$$

Resolvendo a relação de dispersão para  $\Gamma$ , obtemos velocidades de fase  $v_f = \omega/k^r$  e coeficientes de atenuação  $\alpha = -k^i \underline{co}$  mo funções de  $\frac{1}{r}$  e  $\rho^*$  (vide Fig. 5.2.1)

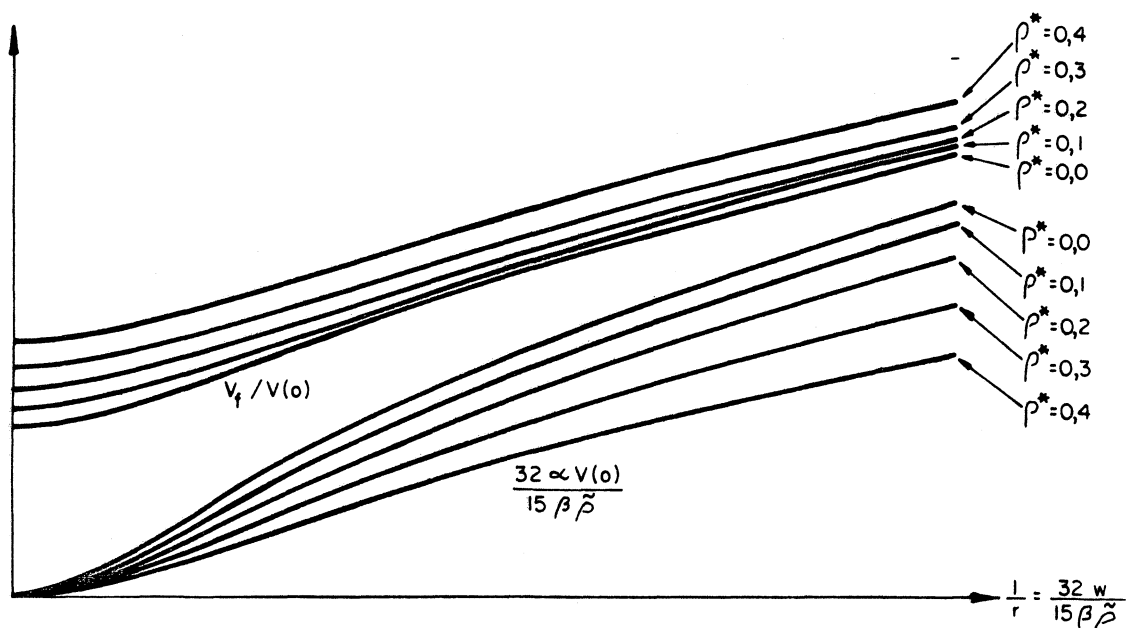


Fig. 5.2.1 - Velocidades de fase e coeficientes de atenuação de acordo com a teoria dos 5 campos.

Para  $w \rightarrow \infty$  ambas as velocidades de fase tendem ao infinito, mostrando que a nossa teoria prevê uma velocidade infinita de propagação para distúrbios de temperatura. Esta constatação não expressa a realidade física e tornou-se conhecida como "o paradoxo da condução de calor".

Para  $w \rightarrow 0$ , a velocidade de fase tende para a velocidade adiabática do som no gás (vide eq. 3.2.10).

## APÊNDICE A

### A. O FATOR $\chi$

Introduzido na Seção 1.5, quando tratamos da equação de Enskog para gases densos, o fator  $\chi$  leva em conta que o aumento da densidade do gás diminui o volume disponível ou volume livre para os átomos desse gás, aumentando assim a probabilidade de colisão.

Para gases ideais, o valor de  $\chi$  é a unidade. O seu valor aumenta na medida em que aumenta a densidade do gás, tendendo ao infinito no caso limite de altas densidades quando o movimento dos átomos se torna impraticável, dada a proximidade de outros átomos. Para gases moderadamente densos, veremos a seguir como obter um valor aproximado para o fator  $\chi$ .

A Fig. A.1 mostra dois átomos representados por duas esferas rígidas de diâmetros iguais a  $a$  no instante da colisão. Consideremos duas esferas de diâmetros iguais a  $2a$ , a que chamaremos de esferas associadas, com centros coincidentes com os centros dos dois átomos que colidem. O centro de cada átomo estará sobre a superfície da esfera de diâmetro  $2a$ , associada ao outro átomo. Dessa forma, o centro de um átomo nunca poderá estar no interior da esfera associada ao outro átomo, a menos que haja interpenetração atômica, o que seria incompatível com o nosso mo-

delo de esfera rígida.

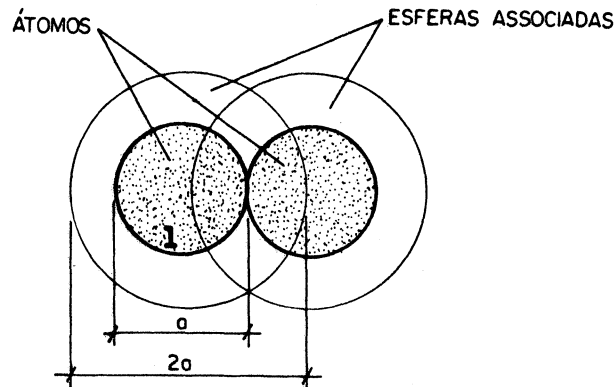


Fig. A.1 - Dois átomos no instante da colisão e suas correspondentes esferas associadas.

Se o gás for moderadamente denso, será pequeno o número de esferas associadas que se interpenetram, constituindo uma pequena fração do número total. Assim, o volume que não poderá ser ocupado pelo centro de um átomo será aproximadamente o volume ocupado pela totalidade das esferas associadas, ou seja,  $\frac{4}{3} \pi n a^3$  por unidade de volume. Então, o volume no qual poderá estar situado o centro de um átomo se reduz à razão  $1 - \frac{4}{3} \pi n a^3$ , ou seja,  $1 - 2\rho b$ , pois

$$\rho b = \frac{2}{3} \pi n a^3, \quad b = \frac{2}{3} \pi \frac{a^3}{m} \quad (\text{A.1})$$

e a probabilidade de colisão aumenta na razão  $1/(1-2\rho b)$ .

Há ainda que se considerar que a probabilidade de colisão é reduzida também pela proteção que um átomo exerce sobre o outro, funcionando como escudo. A Figura A.2 ilustra este caso onde a área hachurada corresponde a uma área  $S$  da superfície esférica da esfera associada ao átomo com índice 1, superfície es

ta que se encontra no interior da esfera associada ao átomo sem índice. Nestas condições, nenhum outro átomo poderá colidir com o átomo 1 e ter seu centro em S no instante da colisão.

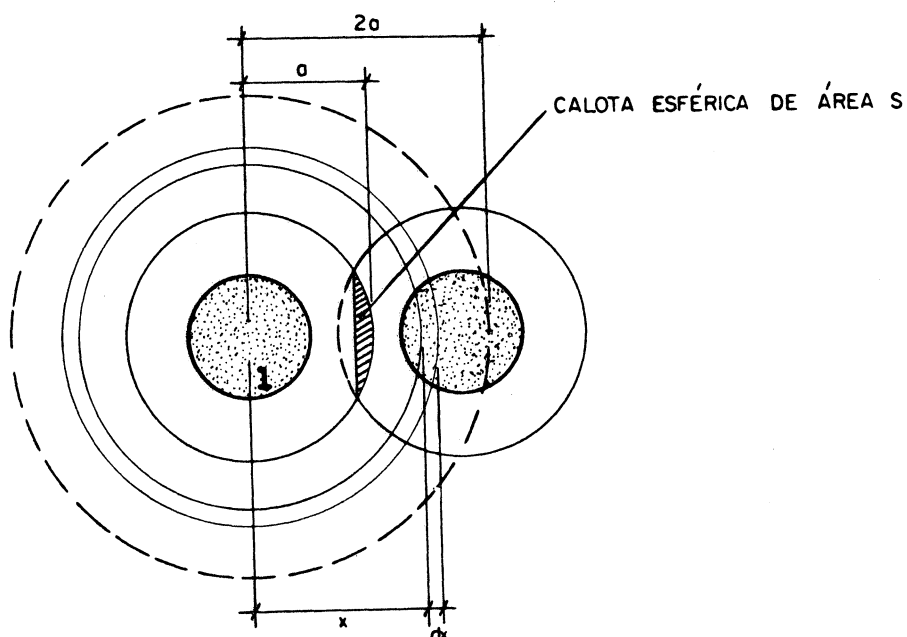


Fig. A.2 - Interpretação das esferas associadas de dois átomos.

Lembrando que estas considerações dizem respeito a gases moderadamente densos, podemos negligenciar os casos em que mais do que duas esferas associadas se interpenetram simultaneamente. Estamos negligenciando portanto, as colisões ternárias, quaternárias, etc.

Seja uma esfera de raio  $x$  e outra de raio  $x + dx$ , com  $x$  variando entre  $a$  e  $2a$ , ambas as esferas concêntricas com o átomo 1. A probabilidade de que a casca esférica de volume  $4\pi x^2 dx$  (volume limitado pelas esferas de raio  $x$  e de raio  $x + dx$ ) contenha o centro do átomo sem índice é  $4\pi n x^2 dx$ . A esfera associada a este átomo seccionaria a esfera associada ao átomo 1 segundo uma calota esférica de altura  $a - \frac{1}{2}x$  e área  $2\pi a(a - \frac{1}{2}x)$ . Assim, a área total provável seccionada da esfera associada ao

átomo 1 pelas esferas associadas a outros átomos é

$$\int_a^{2a} 2\pi a \left(a - \frac{1}{2}x\right) 4\pi n x^2 dx = \frac{11}{3} \pi^2 n a^5. \quad (\text{A.2})$$

Dividindo este valor pela área total da superfície esférica  $4\pi a^2$ , e subtraindo da unidade, obtemos a fração  $1 - \frac{11}{12} \pi n a^3$ , correspondente à porção na qual poderão estar os centros dos átomos no instante da colisão. Portanto, o efeito de proteção exercido pelos outros átomos é no sentido de reduzir a probabilidade de colisão, e podemos obter o valor de  $\chi$  para gases moderadamente densos ao combinarmos os resultados obtidos. Dessa forma, temos

$$\chi = \frac{1 - \frac{11}{12} \pi n a^3}{1 - 2\rho b} = \frac{1 - \frac{11}{8} \rho b}{1 - 2\rho b} = 1 + \frac{5}{8} \rho b, \quad (\text{A.3})$$

correto até a primeira ordem em  $\rho b$ . Outros termos de ordem superior em  $\rho b$  têm sido calculados através de métodos numéricos [08] e [09], o resultado sendo

$$\chi = 1 + \frac{5}{8} \rho b + 0,2869 \rho^2 b^2 + 0,1103 \rho^3 b^3 + 0,0386 \rho^4 b^4 + 0,0138 \rho^5 b^5 + \dots \quad (\text{A.4})$$

O valor de  $\chi$  utilizado nas propagações de ondas harmônicas planas (Seções 3.2 e 5.2) foi o valor expresso em (A.4) representado de uma forma mais precisa com o auxílio do método dos aproximantes de Padê [10].

## APÊNDICE B

### B CÁLCULO DAS INTEGRAIS

#### B.1 FORMULÁRIO

No espaço vetorial tri-dimensional  $\mathcal{V}$ , sendo  $\underline{c}$  um vetor deste espaço, valem as seguintes expressões (vide [12]):

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{V}} c_i c_j f(c^2) d\underline{c} &= \frac{1}{3} \delta_{ij} \int_{\mathcal{V}} c^2 f(c^2) d\underline{c}, \\ \int_{\mathcal{V}} c_i c_j c_n c_s f(c^2) d\underline{c} &= \frac{1}{15} (\delta_{ij} \delta_{ns} + \delta_{in} \delta_{js} + \delta_{is} \delta_{jn}) \int_{\mathcal{V}} c^4 f(c^2) d\underline{c} \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

São encontradiços nas tabelas de integrais os resultados das seguintes integrais definidas:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty c^{2n} e^{-\alpha c^2} d\underline{c} &= \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{(2n-1)!!}{2^n} \left(\frac{1}{\alpha}\right)^{\frac{2n+1}{2}} \\ \int_0^\infty c^{2n+1} e^{-\alpha c^2} d\underline{c} &= \frac{n!}{2} \left(\frac{1}{\alpha}\right)^{n+1} \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

As expressões seguintes são válidas para  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$  (vide [13]):

$$\begin{aligned} \int (\underline{g} \cdot \underline{k})^n d\underline{k} &= \frac{2\pi}{n+1} g^n, \\ \int k_i (\underline{g} \cdot \underline{k})^n d\underline{k} &= \frac{2\pi}{n+2} g^{n-1} g_i, \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$



$$\begin{aligned}
\int k_i k_j (\underline{g} \cdot \underline{k})^n d\underline{k} &= \frac{2\pi}{(n+1)(n+3)} g^{n-2} (g^2 \delta_{ij} + n g_i g_j), \\
\int k_i k_j k_k (\underline{g} \cdot \underline{k})^n d\underline{k} &= \frac{2\pi}{(n+2)(n+4)} g^{n-3} \left[ g^2 (g_i \delta_{jk} + g_j \delta_{ik} + g_k \delta_{ij}) + (n-1) g_i g_j g_k \right], \\
\int k_i k_j k_k k_l (\underline{g} \cdot \underline{k})^n d\underline{k} &= \frac{2\pi}{(n+1)(n+3)(n+5)} g^{n-4} \left[ g^4 (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) + n g^2 (g_i g_j \delta_{kl} + \right. \\
&\quad \left. + g_i g_k \delta_{jl} + g_i g_l \delta_{jk} + g_j g_k \delta_{il} + g_j g_l \delta_{ik} + g_k g_l \delta_{ij}) + n(n-2) g_i g_j g_k g_l \right].
\end{aligned} \tag{B.3}$$

## B.2 PROCEDIMENTO

Consideremos inicialmente que a velocidade relativa  $\underline{g}$  (eq.1.3.17)<sub>1</sub> e a velocidade do centro de massa  $\underline{G}$  (eq.1.3.16)<sub>1</sub> podem ser escritas em função da velocidade peculiar na forma

$$\underline{g}_i = \underline{C}'_i - \underline{C}_i, \quad \underline{G}_i = \frac{\underline{C}'_i + \underline{C}_i}{2}. \tag{B.4}$$

A partir destas duas equações, podemos facilmente mostrar que

$$\underline{C}_i = \underline{G}_i - \frac{\underline{g}_i}{2}. \tag{B.5}$$

Feitas estas considerações iniciais, o produto  $ff_1$  pode ser obtido das eqs.(2.3.5) e (B.5), na forma

$$\begin{aligned}
ff_1 &= \left(\frac{\rho}{m}\right)^2 \left(\frac{m}{2kT}\right)^3 \exp \left[ -\frac{m}{2kT} \left( 2G^2 + \frac{g^2}{2} \right) \right] \left\{ 1 + \frac{k_{ij}}{2\rho} \left( \frac{m}{kT} \right)^2 \left( 2G_i G_j + \frac{1}{2} g_i g_j \right) + \right. \\
&\quad \left. + \frac{g_i}{\rho} \left( \frac{m}{kT} \right)^2 \left\{ 2G_i \left[ \frac{m}{5kT} \left( G^2 + \frac{1}{4} g^2 \right) - 1 \right] + \frac{m}{5kT} g_i g_l G_l \right\} \right\}.
\end{aligned} \tag{B.6}$$

Também, das eqs.(1.3.16)<sub>1</sub> e (1.3.17)<sub>1</sub>, obtemos facil -

mente que

$$d\tilde{\xi} d\tilde{\xi}_1 = d\tilde{g} d\tilde{g} \quad (\text{B.7})$$

Tendo em conta que a estrutura do cálculo é a mesma tanto para o cálculo dos momentos como para o cálculo das produções (eqs.2.4.1), mostraremos somente o desenvolvimento do cálculo da produção  $\tilde{P}_{ij}^I$ , dada pela eq.(2.2.2):

$$\tilde{P}_{ij}^I = \lambda \int m(C_i' C_j' - C_i C_j) f f_1 \tilde{a}^2(\tilde{g} \cdot \tilde{k}) d\tilde{k} d\tilde{\xi} d\tilde{\xi}_1 + \frac{\alpha}{2} \lambda \int m(C_i' C_j' - C_i C_j) k_i f f_1 \nabla_j \ln \frac{f}{f_1} \tilde{a}^2(\tilde{g} \cdot \tilde{k}) d\tilde{k} d\tilde{\xi} d\tilde{\xi}_1. \quad (\text{B.8})$$

Com o auxílio da eq.(1.3.23)

$$\tilde{g} - \tilde{g}' = \tilde{k} \left[ \tilde{k} \cdot (\tilde{g} - \tilde{g}') \right] \quad (\text{B.9})$$

e da eq.(1.3.25), aqui expressa em termos da velocidade peculiar (componentes cartesianas),

$$C_i' = C_i + k_i (\tilde{g} \cdot \tilde{k}), \quad (\text{B.10})$$

chegamos facilmente à expressão

$$C_i' C_j' = C_i C_j + C_i k_j (\tilde{g} \cdot \tilde{k}) + C_j k_i (\tilde{g} \cdot \tilde{k}) + k_i k_j (\tilde{g} \cdot \tilde{k})^2. \quad (\text{B.11})$$

Substituindo as eqs. B.5, B.6, B.7 e B.11 na eq. B.8, obtemos para a primeira integral desta equação a que chamaremos de  $I_1$ , a expressão

$$I_1 = \int m \left[ \left( G_i - \frac{g_i}{2} \right) k_j (g \cdot k) + \left( G_j - \frac{g_j}{2} \right) k_i (g \cdot k) + k_i k_j (g \cdot k)^2 \right] \left( \frac{\rho}{m} \right)^2 \left( \frac{m}{2kT} \right)^3 \exp \left[ -\frac{m}{2kT} \left( 2G^2 - \frac{g^2}{2} \right) \right] \left\{ 1 + \right. \\ \left. + \frac{p_{ij}}{2\rho} \left( \frac{m}{kT} \right)^2 \left( 2G_i G_j + \frac{1}{2} g_i g_j \right) + \frac{q_i}{\rho} \left( \frac{m}{kT} \right)^2 \left\{ 2G_i \left[ \frac{m}{5kT} \left( G^2 + \frac{1}{4} g^2 \right) - 1 \right] + \frac{m}{5kT} g_i g_n G_n \right\} \right\} a^2 (g \cdot k) dk d\mathbf{g} d\mathbf{G}. \quad (\text{B.12})$$

Integramos esta equação inicialmente em  $\theta$  e  $\epsilon$ , utilizando para isso as eqs. B.3. A seguir, com o auxílio das eqs. B.1 e B.2, fazemos as integrações finais, negligenciamos os termos não lineares e obtemos

$$I_1 = \frac{16}{5} a^2 \chi \frac{\rho}{m} \left( \frac{kT}{m} \right)^{1/2} p_{ij}. \quad (\text{B.13})$$

A segunda integral da eq. B.7, a que chamaremos de  $I_2$ , tem procedimento de cálculo análogo ao da integral  $I_1$ , com o detalhe de que nesta integral aparece o fator  $\nabla_j \ln \frac{f}{f_1}$ . Lembrando que a função de distribuição fora do equilíbrio  $f$  pode ser escrita na forma

$$f = f_M (1 + \phi), \quad (\text{B.14})$$

onde  $f_M$  é a maxwelliana e  $\phi$  o desvio, obtemos

$$f f_1 \nabla_j \ln \frac{f}{f_1} = f_M f'_M \nabla_j \ln \frac{f_M}{f'_M} + f_M f'_M \nabla_j (\phi - \phi_1), \quad (\text{B.15})$$

onde

$$f_M f'_M \nabla_j \ln \frac{f_M}{f'_M} = - \left( \frac{\rho}{m} \right)^2 \left( \frac{m}{2kT} \right)^3 \exp \left[ -\frac{m}{kT} \left( G^2 + \frac{g^2}{4} \right) \right] \frac{m}{kT} \left( g_i \frac{\partial g_i}{\partial x_j} + G_i g_i \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right), \quad (\text{B.15'})$$

e

$$\begin{aligned}
\frac{f}{f_m} \frac{f'}{f_m} \nabla_j (\phi - \phi_j) = & - \left( \frac{\rho}{m} \right)^2 \left( \frac{m}{2kT} \right)^3 \exp \left[ - \frac{m}{kT} \left( G^2 + \frac{g^2}{4} \right) \right] \left\{ \frac{1}{2\rho} \left( \frac{m}{kT} \right)^2 (G_n g_s + G_s g_n) \frac{\partial \phi_{\langle ns \rangle}}{\partial x_j} + \right. \\
& \left. + \frac{1}{\rho} \left( \frac{m}{kT} \right)^2 \left[ \frac{m}{5kT} \left( G_n^2 g_n + 2 G_n G_\ell g_\ell + \frac{1}{4} g_s^2 g_n \right) - g_n \right] \frac{\partial q_n}{\partial x_j} \right\}, \quad (\text{B.15''})
\end{aligned}$$

onde negligenciamos os termos não lineares.

Podemos agora proceder ao cálculo da integral  $I_2$  seguindo os mesmos passos do cálculo da integral  $I_1$ , o resultado sendo

$$I_2 = \frac{6}{5} \rho^2 b_\chi \frac{kT}{m} \frac{\partial v_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}} + \frac{6}{25} \rho b_\chi \frac{\partial q_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}}. \quad (\text{B.16})$$

Finalmente, das eqs. B.13 e B.16, obtemos que

$$\tilde{P}_{ij}^I = \frac{16}{5} a_\chi^2 \frac{\rho}{m} \left( \frac{kT}{m} \right)^{1/2} p_{\langle ij \rangle} + \frac{6}{5} \rho^2 b_\chi \frac{kT}{m} \frac{\partial v_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}} + \frac{6}{25} \rho b_\chi \frac{\partial q_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}}. \quad (\text{B.17})$$

## BIBLIOGRAFIA

- | 01 | Chapman, Sydney & T.G. Cowling, The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases, Cambridge University Press, Cambridge (1970).
- | 02 | Ferziger, J.H. & H.G. Kaper, Mathematical theory of transport processes in gases, North-Holland Publishing Company, Amsterdam (1972).
- | 03 | Kogan, M.N., Rarefied Gas Dynamics, Plenum Press, New York (1969).
- | 04 | Enskog, David, Kinetic Theory of Heat Conduction, Viscosity, and Self-Difusion in Compressed Gases and Liquids, tradução de Mr. J. Kopp em "Kinetic Theory, vol. 3", Editor S.G. Brush, 226-259, Pergamon Press, Oxford (1972).
- | 05 | Müller, Ingo, Thermodynamics, Pitman Advanced Publishing Program, London (1985).
- | 06 | Kogan, M.N., On the Principle of Maximum Entropy, Proceedings of the Fifth International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, vol. I, 359-368, Academic Press (1967).
- | 07 | Grad, H., On the Kinetic Theory of Rarefied Gases, Commun. Pure Appl. Math., 2, 331-407 (1949).
- | 08 | Hoover, William G. & F.H. Ree, Fifth and Sixth Virial Coefficients for Hard Spheres and Hard Disks, J. Chem. Phys., 40, 939-950 (1964).
- | 09 | Hoover, William G. & F.H. Ree, Seventh Virial Coefficients for Hard Spheres and Hard Disks, J. Chem. Phys., 46, 4181-4197 (1967).
- | 10 | Ralston, Anthony & P. Rabinowitz, A First Course in Numerical Analysis, McGraw Hill International Book Company, Singapore (1984).
- | 11 | Ikenberry, E. & O. Truesdell, On the Pressure and the Flux of Energy in a Gas according to Maxwell's Kinetic Theory I, J. Rational Mech. Anal., 5, 1-54 (1956).
- | 12 | Truesdell, C. & R.G. Muncaster, Fundamental of Maxwell's Kinetic Theory of a Simple Monatomic Gas, Treated as a Branch of Rational Mechanics, Academic Press, New York (1980).
- | 13 | Kremer, Gilberto M., Kinetic Theory of Rarefied Gas of Rough Spheres, Rev. Bras. Fís., 17 (1987).